



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA

**“Evaluación de inventarios de emisiones de monóxido de carbono
mediante el empleo de información satelital y modelación”**

TESIS

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE DOCTOR
EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

**PRESENTA:
GILBERTO MALDONADO PACHECO**

**TUTOR:
DR. JOSÉ AGUSTÍN GARCÍA REYNOSO (Centro de Ciencias de la Atmósfera)**

**MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:
DR. WOLFGANG STREMME (Centro de Ciencias de la Atmósfera)
DR. LUIS GERARDO RUIZ SUÁREZ (Centro de Ciencias de la Atmósfera)**

CIUDAD DE MÉXICO, SEPTIEMBRE 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICATORIA

*A mis padres por confiar en mí,
apoyarme y siempre alentarme
durante este proceso*

*A mis hermanos por motivarme
a lograr este objetivo y
a alcanzar nuevas metas*

*A mis amigos y compañeros
por todo lo aprendido, convirtiéndolo
en una etapa inolvidable*

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Agustín García Reynoso por apoyarme, confiar en mí y orientarme en el proceso de creación de este trabajo de investigación.

Al Dr. Wolfgang Stremme por el apoyo brindado durante esta investigación.

Al grupo de Espectroscopía y Percepción Remota dirigido por el Dr. Michel Grutter de la Mora, por el apoyo y datos de columna brindados.

Al Concejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico otorgado para realizar el doctorado y terminar el presente trabajo de investigación.

IASI es una misión conjunta de Eumetsat y el Centro Nacional de Estudios Espaciales (CNES, Francia). Los autores reconocen la infraestructura de datos de Aeris (<http://iasi.aeris-data.fr/CO/>) por proporcionar acceso a los datos de IASI CO utilizados en este estudio y a ULB-LATMOS por el desarrollo de los algoritmos de recuperación.

A LANCAD y CONACYT por el tiempo de computación otorgado en la supercomputadora Miztli en DGTIC UNAM.

A la M. en C. Bertha Eugenia Mar Morales por el apoyo en la generación de imágenes de alta calidad presentada en esta tesis.

A DGAPA-PAPIIT IN111418 de la UNAM por su apoyo con la infraestructura computacional. Asimismo, agradecemos al Dr. Alejandro Bezanilla Morlot por su apoyo para el uso de la infraestructura computacional en el Centro de Ciencias de la Atmósfera.

Al Posgrado en Ciencias de la Tierra y al Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM por permitirme llevar a cabo mis estudios de doctorado.

Al Fondo IE-CCA por el apoyo económico otorgado durante el proceso de obtención de grado.

RESUMEN

En el presente trabajo de investigación se evaluó el inventario de emisiones mediante la comparación de la columna total de monóxido de carbono (CO) obtenida de los datos satelitales del *Infrared Atmospheric Sounding Interferometer* (IASI) y el algoritmo *Fast Optimal Retrievals on Layers for IASI* (FORLI-CO) contra los resultados del modelo WRF-Chem utilizando los inventarios de emisiones 2008 y 2014. El análisis se llevó a cabo para las 10 a.m., hora del paso satelital por el centro de México. El dominio modelado comprende la zona centro de México y consiste en una malla de 90 x 90 celdas a una resolución de 3 kilómetros. Se subdividió en regiones y se analizaron tres casos de estudio: 6 regiones (usando el inventario 2008), 9 regiones (utilizando los inventarios 2008) y 9 regiones (empleando los inventarios 2014). El periodo modelado corresponde al mes de febrero de 2011 y se compararon las columnas totales del modelo y del satélite mediante métodos de inversión. A partir de este análisis, se obtuvieron factores de escalamiento para las emisiones de CO en cada una de las regiones de estudio, los cuales se utilizaron para actualizar las emisiones originales.

Para la Ciudad de México se obtuvieron factores de escalamiento menores a 1 respecto a los originales, lo cual indica una sobrestimación de las emisiones originales. No obstante, en otras regiones, como Hidalgo y la concentración de fondo, se estimaron factores mayores a 1 con relación a los originales, sugiriendo una subestimación. Respecto a las emisiones totales escaladas, se obtuvieron diferencias menores al 25% entre los inventarios 2008 y 2014 para las distintas regiones de estudio. Por otra parte, se encontró que las diferencias de columna total entre el modelo y el instrumento satelital se redujeron al emplear las emisiones escaladas. Asimismo, las diferencias en superficie entre las observaciones y los datos modelados también disminuyeron. Los resultados sugieren que la metodología empleada es un primer paso para obtener emisiones actualizadas de monóxido de carbono en caso de no contar con datos oficiales de incertidumbre en las emisiones que ayuden a identificar la emisión actual para el periodo y dominio de estudio.

ÍNDICE GENERAL

1.- INTRODUCCIÓN.....	1
2.- ANTECEDENTES	2
2.1 Generalidades del monóxido de carbono.....	2
2.2 Inventarios de emisiones.....	3
2.3 Mediciones satelitales.....	4
2.4 WRF-Chem: Proceso general de ejecución.....	5
2.5 Investigaciones previas relacionadas con mediciones satelitales de monóxido de carbono.....	6
3.- OBJETIVOS	8
3.1 General.....	8
3.2 Particulares.....	8
4.- HIPÓTESIS	8
5.- METODOLOGÍA.....	8
5.1 Modelación y datos satelitales	9
5.2 Regiones de estudio	11
5.3 Cálculo de columnas modeladas	13
5.4 Comparación contra datos satelitales	14
5.5 Comparación contra mediciones en superficie	18
6.- RESULTADOS.....	20
6.1 Caso de estudio 1: 6 regiones de estudio empleando el inventario de emisiones 2008.....	20
6.1.1 Factores de escalamiento y emisión total para el caso 1.	20
6.1.2 Comparaciones de columna total entre el satélite y el modelo.....	21
6.1.3 Comparaciones contra mediciones en superficie	23
6.1.3.1 Diagramas de caja y bigote	23
6.3.1.2 Estadísticos	24
6.3.1.3 Series de tiempo.....	26
6.2 Caso de estudio 2 y 3: 9 regiones empleando inventarios de emisiones 2008 y 2014 respectivamente.	30
6.2.1 Factores de escalamiento y emisión total para los casos 2 y 3.	30
6.2.2 Comparaciones de columna total entre el satélite y el modelo.....	32
6.2.2.1 Caso 2	32
6.2.2.2 Caso 3	33
6.2.3 Comparaciones de columna medidas en superficie contra columnas modeladas.....	35

6.2.3.1 Caso 2	35
6.2.3.2 Caso 3	36
6.2.4 Comparación contra mediciones en superficie	37
6.2.4.1 Gráficos de caja y bigote	37
6.2.4.2 Estadísticos	38
6.2.4.3 Series de tiempo.....	40
7.- ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	44
8.- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	47
REFERENCIAS	49
ANEXO 1: Evaluación de las variables meteorológicas.....	57
Temperatura	57
Humedad relativa	59
Componente zonal del viento (U).....	61
Componente meridional del viento (V)	63
ANEXO 2: Programas empleados en el cálculo de los factores de escalamiento	65

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1 Perfil vertical de CO en una atmósfera estándar incluyendo fuentes y sumideros, así como la sensibilidad vertical de diferentes técnicas de percepción remota. MW y TIR se refiere a radiación en microondas y emisión térmica en el infrarrojo respectivamente	2
2.2 Perfil horario de CO en la Ciudad de México	3
2.3 Procedimiento general de ejecución del modelo WRF-Chem.....	6
5.1 Dominio modelado.....	11
5.2 Regiones de estudio para el caso de 6 regiones	12
5.3 Regiones de estudio para los casos de 9 regiones.....	12
5.4 Sitios de medición empleados para evaluar el desempeño del modelo en superficie.....	19
6.1 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios a) originales y b) escalados del año 2008 para el caso 1	22

6.2 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2008 originales y escalados para el caso 1.....	22
6.3 Comparación de los datos modelados y observados en superficie a las 10 a.m. para las estaciones de la RAMA (caso 1).....	23
6.4 Comparación de los datos modelados y observados en superficie a las 10 a.m. para las estaciones del Estado de México (caso 1).....	24
6.5 Series de tiempo para las estaciones de la RAMA (IZT, MER, SUR, TLA, UIZ) comparando las observaciones contra el modelo empleando 6 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008.....	27
6.6 Series de tiempo para los sitios de medición en el Estado de México (AME, TEN y OZU) comparando las observaciones contra el modelo empleando 6 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008.....	29
6.7 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios a) originales y b) escalados del año 2008 para el caso 2	32
6.8 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2008 originales y escalados para el caso 2	33
6.9 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios a) originales y b) escalados del año 2014 para el caso 3.....	34
6.10 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2014 originales y escalados para el caso 3	34
6.11 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario original 2008.....	35
6.12 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario escalado 2008	35
6.13 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario original 2014	36
6.14 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario escalado 2014	36
6.15 Comparación de datos de la RAMA contra datos modelados utilizando emisiones originales y escaladas de los inventarios 2008 y 2014	37

6.16 Comparación de datos del Estado de México contra datos modelados utilizando emisiones originales y escaladas de los inventarios 2008 y 2014	38
6.17 Series de tiempo para las estaciones de la RAMA (IZT, MER, SUR, TLA, UIZ) comparando las observaciones contra el modelo empleando 9 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008 y 2014.....	42
6.18 Series de tiempo para los sitios de medición en el Estado de México (AME, TEN y OZU) comparando las observaciones contra el modelo empleando 9 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008 y 2014.....	43

ÍNDICE DE TABLAS

6.1 Factores de escalamiento e incertidumbres para el caso 1.....	21
6.2 Emisión total en Tg/año para el caso de estudio 1.....	21
6.3 Índice de concordancia para los sitios de medición (caso 1).....	25
6.4 RMSE (en mL/m³) para los sitios de medición (caso 1).....	25
6.5 Factores de escalamiento e incertidumbres para los casos 2 y 3.....	30
6.6 Emisiones totales escaladas en Tg/año para el los casos 2 y 3.....	31
6.7 Índice de concordancia para los sitios de medición en los casos 2 y 3.....	39
6.6 RMSE (en mL/m³) para los sitios de medición en los casos 2 y 3.....	40

1.- INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta la evaluación de los inventarios de emisiones de los años 2008 y 2014 para monóxido de carbono mediante la comparación con observaciones satelitales del instrumento IASI a bordo del satélite MetOp-A y la modelación de calidad del aire empleando el modelo WRF-Chem.

En la metodología se describe el procesamiento de los resultados del modelo para generar las columnas de CO con base en las condiciones atmosféricas y la ecuación de estado. Posteriormente se describe el procedimiento seguido para comparar las columnas de CO del modelo con las satelitales, así como el método de inversión para la obtención de los factores de escalamiento. Después, se presenta la evaluación del desempeño del modelo en superficie, donde se describen las métricas estadísticas empleadas para obtener valores cuantitativos de comparación entre los distintos resultados de la modelación y las mediciones. Con lo anterior, se realizó el cálculo de la emisión total de cada región.

En este trabajo se describen tres estudios de caso, en el primero se emplea un inventario dividido en seis regiones de emisiones utilizando el inventario de emisiones del 2008, en el segundo caso se emplean nueve regiones de emisión y el inventario 2008 y en el caso 3 son nueve regiones y el inventario 2014. Los resultados de cada caso y lo estadísticos se presentan tanto en gráficos de caja y bigote, como en series de tiempo para obtener una comparación cualitativa, así como en tablas estadísticas para la evaluación cuantitativa.

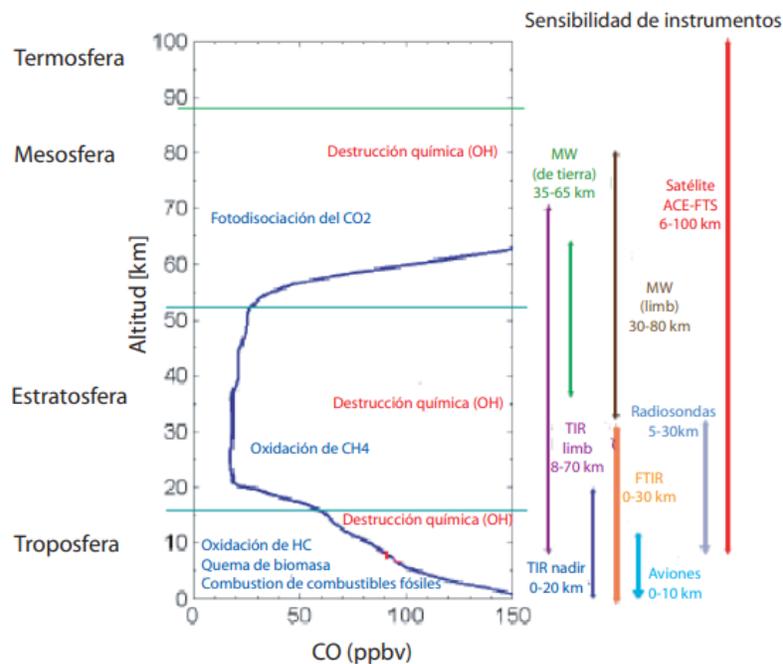
En el análisis de resultados se presentan los valores obtenidos de emisión total para ambos inventarios, la cual converge a un valor similar. Por otra parte, se observa que ciertas regiones poseen un factor de escalamiento similar a uno, en algunas es superior indicando una posible subestimación de emisiones y en otras es menor indicando sobreestimación. En la parte final se dan las conclusiones y recomendaciones para realizar más estudios en el área.

2.- ANTECEDENTES

2.1 Generalidades del monóxido de carbono

El monóxido de carbono (CO) es un contaminante criterio cuyas concentraciones se miden de manera continua en el centro de México dados los efectos en la salud que puede provocar asociados con cambios patológicos y fisiológicos, y en casos extremos la muerte (Wark and Warner, 1998).

En superficie es emitido principalmente por la quema de combustibles fósiles y biomasa (Kerzenmacher *et al.*, 2012; Stremme *et al.*, 2013), mientras que en la atmósfera alta sus principales fuentes son la oxidación de hidrocarburos y la fotodisociación de dióxido de carbono (Figura 2.1) (Clerbaux *et al.*, 2008^a). El sumidero más importante está relacionado con la reacción química del CO y el radical hidroxilo, aunque en superficie también puede darse absorción por suelos y vegetación (Kerzenmacher *et al.*, 2012).

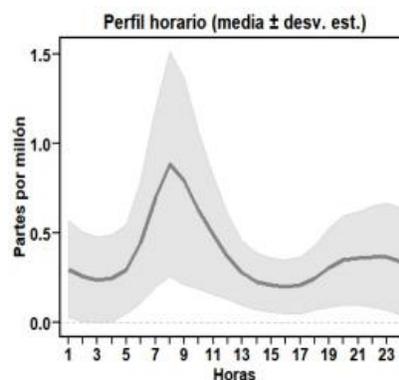


Fuente: Clerbaux *et al.*, 2008^a. Modificada por Ortega *et al.*, 2009.

Figura 2.1 Perfil vertical de CO en una atmósfera estándar incluyendo fuentes y sumideros, así como la sensibilidad vertical de diferentes técnicas de percepción remota. MW y TIR se refiere a radiación en microondas y emisión térmica en el infrarrojo respectivamente.

Además, el CO ha sido utilizado como trazador atmosférico debido a que cuenta con un tiempo de vida que oscila de semanas a meses, dependiendo de la ubicación en donde se realice el análisis (Rinsland *et al.*, 2006; De Foy *et al.*, 2007; Funke *et al.*, 2007; Turquety *et al.*, 2008; George *et al.*, 2009).

Otra característica importante de este contaminante se encuentra en su perfil horario. En la Ciudad de México se observado que su concentración tiene un máximo en las horas de la mañana (entre 8 y 10 a.m.), disminuye en la tarde e incrementa en las primeras horas de la noche (Figura 2.2). Este perfil está estrechamente relacionado con el flujo vehicular propio de estas horas del día dado que es su principal fuente.



Fuente: <http://www.aire.cdmx.gob.mx/>

Figura 2.2 Perfil horario de CO en la Ciudad de México

2.2 Inventarios de emisiones

En el país se ha publicado el Inventario Nacional de Emisiones de México (INEM) correspondientes a los años 2005, 2008, 2013 y 2016¹. Asimismo, existen inventarios locales que consideran ciudades y regiones importantes del país, como el generado para la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), el cual se ha actualizado de forma regular cada dos años (desde los años 90) y su última versión incluye los datos del año 2016.

¹ <https://www.gob.mx>

La importancia de los inventarios de emisiones radica en que son un instrumento fundamental para gestionar la calidad del aire, ya que permiten identificar las fuentes de emisión y estimar sus aportes de contaminantes en un tiempo y espacio determinados (SEMARNAT, 2018). Asimismo, permiten evaluar la eficiencia de la aplicación de las medidas de control de la contaminación del aire².

Los inventarios consideran las emisiones provenientes de fuentes móviles, puntuales, de área y naturales. Las fuentes puntuales se caracterizan por ser estacionarias o estar en un punto fijo como las plantas de energía, industrias químicas, refinerías de petróleo y fábricas. Las fuentes móviles abarcan todas las formas de transporte y los vehículos automotores e incluyen: tractocamiones, autobuses, camiones, automóviles, motocicletas, aviones, helicópteros, ferrocarriles, tranvías, embarcaciones, equipo y maquinarias¹.

Las fuentes de área representan aquellas fuentes pequeñas, numerosas y dispersas que no pueden ser incluidas de manera eficiente en un inventario de fuentes fijas. Sin embargo, colectivamente las fuentes de área representan un porcentaje significativo de las emisiones de contaminantes. En las fuentes de área se incluyen los comercios, servicios, casas habitación, entre otros. En cuanto las fuentes naturales, se trata de cualquier fuente o proceso natural en la vegetación y los suelos que genere emisiones. Suelen incluirse las emisiones biogénicas, las emisiones del suelo y la erosión eólica¹.

2.3 Mediciones satelitales

Además de las mediciones continuas realizadas a nivel de superficie, el CO también es medido a diferentes alturas empleando instrumentos a bordo de satélites tales como: Measurement of Pollution in the Troposphere (MOPITT), Tropospheric Emission Spectrometer (TES), Infrared Atmospheric Sounding Interferometer (IASI), entre otros.

² <http://www.aire.cdmx.gob.mx/>

Generalmente este tipo de instrumentos se encuentran a bordo de satélites con una altitud aproximada entre 700 y 800 km en órbita polar y la frecuencia con la que cubren el planeta puede contarse en semanas o incluso en días. Asimismo, realizan mediciones de radiación infrarroja emitida por la superficie del planeta en diferentes rangos espectrales, según las variables que se deseen analizar y las cuales pueden incluir variables meteorológicas (como temperatura, humedad relativa, cobertura nubosa) y químicas (monóxido de carbono, ozono, dióxido de azufre, etc.).

Las mediciones satelitales son procesadas por algoritmos que emplean métodos de inversión y toman en cuenta la física de las mediciones (Rodgers, 2000) con el propósito de obtener perfiles de las diferentes variables a analizar (entre ellas los contaminantes atmosféricos). Además, esta información viene acompañada de datos como los kernel promedio, el perfil a priori, cobertura nubosa, etc. que permiten comprender de forma más eficiente los valores reportados por los algoritmos.

2.4 WRF-Chem: Proceso general de ejecución

En la figura 2.3 se resume el procedimiento para realizar simulaciones con el modelo WRF-Chem. Inicialmente se define el dominio a modelar utilizando el programa GEOGRID. En seguida, se emplea el programa UNGRIB para extraer los datos meteorológicos y posteriormente se utiliza METGRID, el cual los interpola horizontalmente a la malla establecida en el dominio.

A continuación, se ejecuta el programa *real.exe* el cual realiza las interpolaciones verticales de los datos meteorológicos a los niveles en el modelo. Después, se ejecuta el programa *wrf.exe* que emplea como entrada la información meteorológica procesada y las emisiones de los archivos de los inventarios. Con lo anterior resuelve las ecuaciones atmosféricas de meteorología y química para generar los campos de concentraciones para el periodo seleccionado. Finalmente, los resultados del modelo son postprocesados para su análisis y visualización

empleando herramientas como GrADS, ncview, Panoply, Model Evaluation Tools (MET), reaf_wrf, etc.

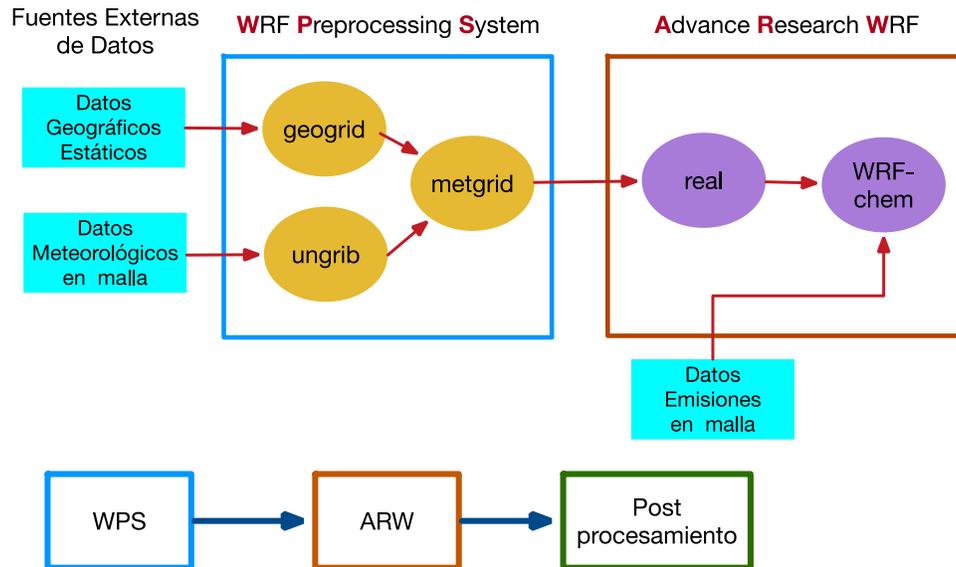


Figura 2.3 Procedimiento general de ejecución del modelo WRF-Chem

2.5 Investigaciones previas relacionadas con mediciones satelitales de monóxido de carbono

La información satelital ha sido utilizada ampliamente en estudiar el transporte de CO a diferentes niveles de la atmósfera y se ha encontrado que puede proveer información de las concentraciones en superficie y su dispersión en áreas urbanas contaminadas (Clerbaux *et al.*, 2008^b; Fagbeja *et al.*, 2015; Rakitin *et al.*, 2015). Asimismo, los datos satelitales se han empleado en estudios que involucran la evaluación de emisiones de este contaminante en diferentes regiones del planeta (Pétron *et al.*, 2004; Tanimoto *et al.*, 2009; Kopacz *et al.*, 2009; Kopacz M. *et al.*, 2010).

Entre estas investigaciones se encuentra la presentada por Liu *et al.* (2005), quienes estudiaron la capacidad de MOPPIT para detectar emisiones de CO provenientes de grandes incendios forestales en los Estados Unidos durante el año 2000. Además, Clerbaux *et al.* (2008^b) investigaron la posibilidad de usar las mediciones de MOPITT en superficie para detectar CO emitido en ciudades y centros urbanos;

George *et al.* (2009) compararon las distribuciones globales de CO de IASI contra las observaciones de distintos instrumentos satelitales; Turquety *et al.* (2009) analizaron el rendimiento de IASI para el monitoreo de monóxido de carbono durante eventos de incendios extremos, centrándose en los incendios récord que devastaron Grecia en agosto de 2007; Pommier *et al.* (2010) hicieron una comparación detallada de los datos observados por IASI con mediciones de aeronaves sobre el Ártico; Klonecki A. *et al.* (2012) evaluaron el producto IASI CO contra mediciones de aeronaves del programa MOZAIC y la campaña POLARCAT; Marey *et al.* (2015) presentaron un análisis basado con información satelital para explorar los factores que contribuyen a los niveles de concentración de CO troposférico en Alberta, Canadá; Rakitin *et al.* (2017) estimaron las tendencias de CO total sobre Eurasia utilizando información del satélite *Atmospheric Infrared Sounder* (AIRS); entre otros estudios.

En México se han realizado investigaciones como la publicada por de Foy *et al.* (2007), donde las mediciones de columna de CO, derivadas de espectrómetros infrarrojos por transformada de Fourier (FTIR por sus siglas en inglés), se utilizaron para restringir la emisión de este contaminante en modelos numéricos además de evaluar la emisión en el inventario de emisiones de esta región, Stremme *et al.* (2013) presentaron una nueva metodología para estimar las emisiones de monóxido de carbono en áreas urbanas basada en un enfoque *top-down* utilizando mediciones FTIR de satélite y en superficie, Bauduin *et al.* (2016), investigaron la capacidad de IASI para recuperar concentraciones de CO cercanas a la superficie y evaluar la influencia del contraste térmico en sus recuperaciones, etc.

En cuanto a este trabajo de investigación, se busca reducir las diferencias entre los valores observados y modelados de CO para un periodo específico al escalar las emisiones originales empleando factores de escalamiento obtenidos del análisis de los datos de IASI y el modelo WRF-Chem. Esto es especialmente importante dado que en México los inventarios nacionales de emisiones se han publicado con una frecuencia igual o mayor a 3 años y esta investigación es un primer paso para la

obtención en emisiones actualizadas de CO en caso de no contar con datos oficiales actualizados

3.- OBJETIVOS

3.1 General

Evaluar los inventarios de emisiones 2008 y 2014 de monóxido de carbono mediante el empleo de datos de columna satelitales y modelados.

3.2 Particulares

- Elegir el periodo de análisis.
- Generar los archivos de emisiones de monóxido de carbono para el periodo de estudio.
- Estimar factores de escalamiento.
- Escalar los inventarios de emisiones de monóxido de carbono.
- Evaluar el desempeño del modelo.

4.- HIPÓTESIS

Se pueden estimar las emisiones de monóxido de carbono en la región centro del país para el mes de febrero del 2011 al escalar los inventarios de emisiones 2008 y 2014 empleando factores de escalamiento calculados mediante la aplicación de un método de inversión a las observaciones satelitales y los resultados del modelo.

5.- METODOLOGÍA

En este apartado se describe el uso del modelo de calidad del aire, los datos de meteorología, la configuración empleada para la modelación, los datos satelitales utilizados, así como el procedimiento para el cálculo de factores de escalamiento. Esta sección forma parte del artículo de Maldonado-Pacheco *et al.* (2021) aceptado para su publicación en la revista *Atmósfera*.³

³ <https://www.revistascca.unam.mx/>

5.1 Modelación y datos satelitales

El modelo WRF-Chem (Grell *et al.*, 2005; Fast *et al.*, 2006) se alimentó con datos meteorológicos de renálisis de NCAR a un grado de resolución para generar campos de concentraciones de monóxido de carbono en una malla que consta de 90 x 90 celdas a 3 kilómetros de resolución (Figura 5.1) incluyendo una actualización en la cobertura urbana (López-Espinoza *et al.*, 2011). Se usaron las siguientes parametrizaciones: para la capa límite el esquema YSU (Yonsei University) (Song–You *et al.*, 2006), para la microfísica el esquema WSM5 (WRF Single-Moment 5-class) (Song–You *et al.*, 2004), para la radiación de onda larga el esquema RRTM (Rapid and accurate Radiative Transfer Model) (Mlawer *et al.*, 1997), para la radiación de onda corta el esquema de Goddard (Matsui *et al.*, 2018) y para la opción de cúmulus el esquema de Grell-3 (Grell, 1993; Grell *et al.*, 2002). El periodo modelado fue el mes de febrero del año 2011 debido a que en este mes se cuenta con más datos de mediciones en superficie con los cuales se evaluó el desempeño del modelo.

En cuanto a los emisiones, se emplearon los inventarios nacionales de emisiones 2008 y 2014 generados por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT). Incluye información sobre emisiones emitidas a la atmósfera por contaminantes clasificados como criterio: monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrógeno (NO_x), óxidos de azufre (SO_x) y partículas con diámetro aerodinámico menor de 10 y 2.5 micrómetros (PM₁₀ y PM_{2.5}), compuestos orgánicos volátiles (COV) y amonio (NH₃), emitidos por diferentes fuentes. Su elaboración sigue procedimientos internacionales y tiene algunos procedimientos de garantía de calidad para la información de entrada, proceso e informes. Los inventarios anuales de emisiones se procesaron para poder utilizarlo en WRF-chem utilizando la metodología presentada por Garcia *et al.* (2018).

Respecto a los datos satelitales, se utilizaron los medidos por el instrumento IASI. Este instrumento se encuentra a bordo del satélite MetOp-A el cual fue lanzado en el año 2006. Tiene un barrido de 2200 kilómetros lo que le permite observar al

planeta dos veces al día pasando sobre el ecuador aproximadamente a las 09:30 y 21:30 hora local (George *et al.*, 2009; Fortems-Cheiney *et al.*, 2009; Turquety *et al.*, 2009) y sobre México aproximadamente a las 10:00 hora local (Clerbaux *et al.*, 2009; Stremme *et al.*, 2013). Además, su campo de visión es de 50 km proporcionando cuatro mediciones circulares de 12 km de diámetro (Clerbaux *et al.*, 2009; Hilton *et al.*, 2012) y tiene una resolución espectral de 0.5 cm^{-1} en un rango espectral que varía de 645 a 2760 cm^{-1} . La banda de absorción del CO cubre el rango de 2080 a 2200 cm^{-1} , sin embargo, existen interferencias en esta región espectral asociadas a la absorción de H_2O , CO_2 , N_2O y O_3 . Debido a esto el contenido de CO es recuperado en el rango espectral 2143-2181.25 cm^{-1} , donde existen las menores interferencias con otros gases (Crevoisier *et al.*, 2014; De Wachter *et al.*, 2012).

Los datos de columna utilizados son generados por el algoritmo *Fast Optimal Retrievals on Layers for IASI (FORLI)*⁴, el cual estima las columnas de CO en 19 capas con un grosor de 1 km en las primeras 18 capas y la última hasta los 60 km de altitud (Hurtmans *et al.*, 2012; De Wachter *et al.*, 2012). La cobertura nubosa en el pixel de IASI, así como la temperatura en el tope de la nube, la presión y la fase de la misma son parámetros determinados por IASI o en combinación con otros instrumentos a bordo del satélite, y solamente son procesados aquellos pixeles en los que la cobertura nubosa es menor al 25 % (Schlüssel *et al.*, 2005; Clerbaux *et al.*, 2009; Kerzenmacher *et al.*, 2012).

Es importante señalar que en esta investigación se realizaron los análisis con valores de columna total dato que los datos de FORLI a los que se tuvo acceso no contienen las columnas parciales. Además, este algoritmo también reporta el perfil *a priori* (asociado con un perfil climatológico de concentraciones de CO), el perfil de kernels promedio (relacionado con la sensibilidad vertical del instrumento en la recuperación de los datos satelitales), entre otros.

⁴ https://iasi.aeris-data.fr/CO_IASI_A_data/

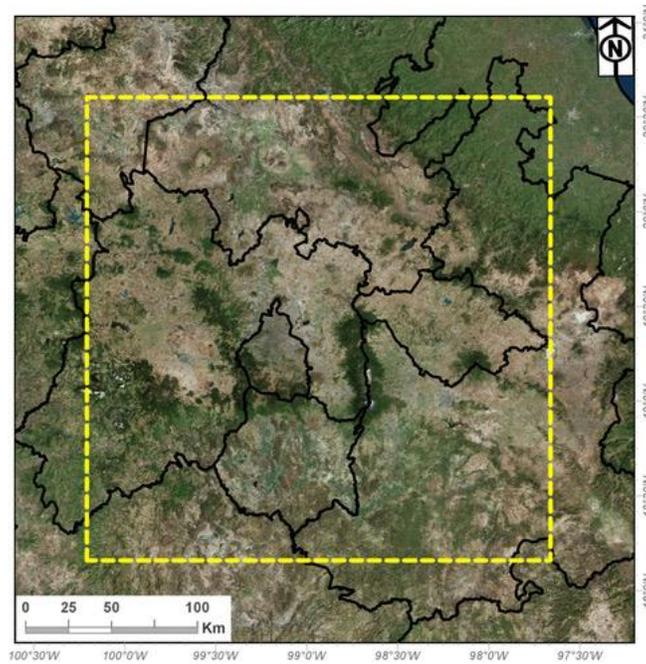


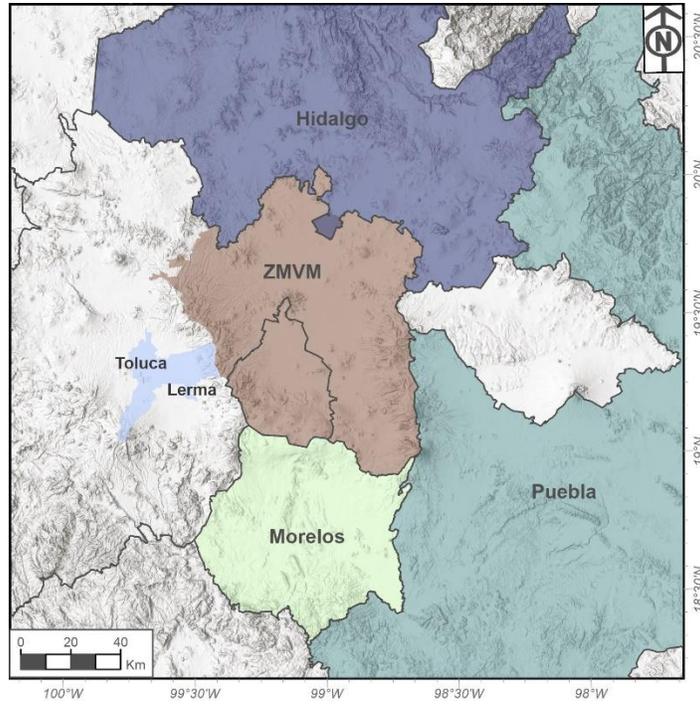
Figura 5.1 Dominio modelado

5.2 Regiones de estudio

El inventario de emisiones se procesó para subdividirlo en regiones elaborando dos diferentes configuraciones:

- a) 6 regiones: La Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), los municipios de Toluca y Lerma, el estado de Morelos, Puebla, Hidalgo y la concentración de fondo (Figura 5.2).
- b) 9 regiones: la Ciudad de México (1), la zona del Estado de México que rodea a la Ciudad de México (2), Toluca (3), Morelos (4), Puebla (5), Tlaxcala (6), Hidalgo (7), el área de la región que resta del dominio (8) y la concentración de fondo (Figura 5.3).

De esta forma se pretende identificar la contribución de cada una de las regiones en la concentración de CO. Posteriormente se modeló el mes de febrero de 2011 empleando estos inventarios y sin procesos de reacción química atmosférica.



Fuente: Maldonado-Pacheco et al., 2021

Figura 5.2 Regiones de estudio para el caso de 6 regiones

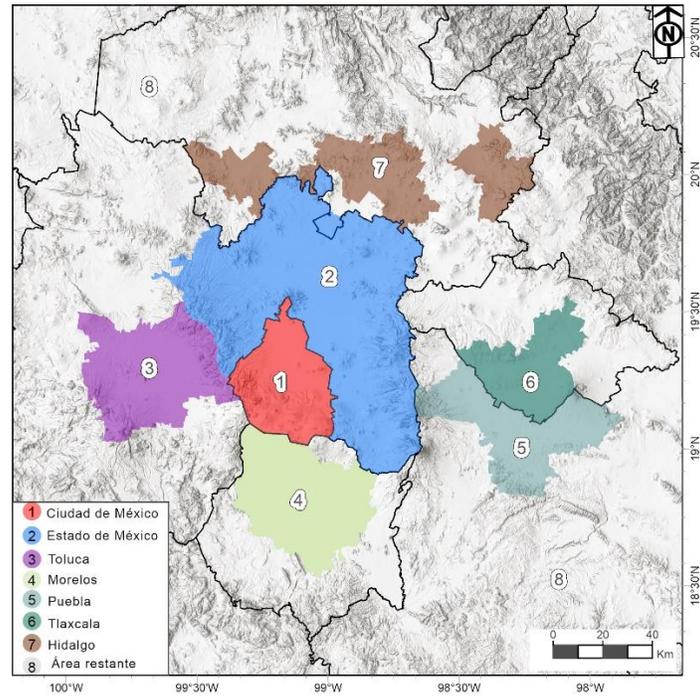


Figura 5.3 Regiones de estudio para los casos de 9 regiones

5.3 Cálculo de columnas modeladas

Se realizaron las comparaciones entre los datos de IASI y modelo a la hora del paso satelital sobre centro de México (aproximadamente a las 10:00 a.m. hora local) (Clerbaux *et al.*, 2009; Stremme *et al.*, 2013).

Debido a que los datos satelitales se encuentran en unidades de *moléculas cm⁻²* es necesario calcular las columnas de CO modeladas en estas unidades con el objetivo de realizar comparaciones. Para este cálculo se utilizó la concentración (en partes por millón en volumen (ppmv)), la temperatura y la presión en cada nivel así como el espesor de cada capa (E_c). Primero, se calcula la altura del modelo de cada nivel y el espesor de cada capa empleando las ecuaciones 1 y 2:

$$Z = \frac{(PH+PHB)}{9.8} \quad (1)$$

$$E_c = Z_{n+1} - Z_n \quad (2)$$

Z: Altura de la capa en metros (m)

Ec: Espesor de la capa (m)

PH: Altura geopotencial (m²s⁻²)

PHB: Perturbación del geopotencial (m²s⁻²)

Después, se utiliza la ecuación de estado (3) para el cálculo de moléculas cm⁻³

$$N (\text{moléculas cm}^{-3}) = \frac{C_{Co} * P * N_A}{R * T * 10^6} \quad (3)$$

donde P

$$P (\text{atm}) = \frac{P_{\text{modelo}} + PB}{101325} \quad (4)$$

N: Concentración de moléculas (moléculas cm⁻³)

C_{Co}: Concentración en ppmv (mL m⁻³)

R: 82.57 (mL atm mol⁻¹ K⁻¹)

N_A: Número de Avogadro (moléculas mol⁻¹)

P_{modelo} : Presión del modelo en cada nivel (Pa)

PB = Perturbación de la presión (Pa)

10^6 : Factor que se utiliza para hacer la conversión de m^3 a cm^3

y T

$$T(K) = (T_{\text{modelo}} + 300) * \left(\frac{P}{P_0}\right)^{0.284} \quad (5)$$

T_{modelo} : Temperatura potencial de perturbación ($\theta - T_0$) (K), ($T_0 = 300$)

P_0 : Presión de referencia (1 atm).

Finalmente, las columnas parciales de cada capa se calculan:

$$Cp = N_i * Ec_i \quad (6)$$

Donde

Cp : Cantidad de moléculas en la columna parcial del modelo (moléculas cm^{-2})

N_i : Concentración de moléculas (moléculas cm^{-3}) en la capa i

Ec_i : espesor de la capa i (cm).

5.4 Comparación contra datos satelitales

De acuerdo con Rodgers y Connor (2003), para comparar columnas totales de diferentes instrumentos, es necesario realizar un tratamiento de los datos que incluya algunas de sus características (Rodgers, 2000; Luo *et al.*, 2007). En este caso, se utilizaron los kernels promedio, los cuales proveen información sobre la sensibilidad vertical de la recuperación satelital (x_{sat}) respecto al estado verdadero de la atmósfera ($x_{\text{verdadero}}$) (ecuación 7a).

$$(x_{\text{sat}} - x_a) = A_{\text{sat}}(x_{\text{verdadero}} - x_a) + \varepsilon \quad (7a)$$

despejando

$$x_{\text{sat}} - (1 - A_{\text{sat}})x_a = A_{\text{sat}}(x_{\text{verdadero}}) + \varepsilon \quad (7b)$$

donde

$x_{verdadero}$: Perfil verdadero de la atmósfera, pero desconocido

A_{sat} : Kernel promedio para los datos de IASI

x_{sat} : Perfil satelital recuperado

x_a : Perfil a priori del instrumento satelital

ε : Error en el perfil recuperado

Dado que los valores de kernel promedio y el perfil a priori se tienen para el satélite se asume que el perfil modelado corresponde al perfil verdadero (ecuación 7a y 7b). Esto no significa que el perfil del modelo sea el verdadero, sino que se calcula la columna que mediría el satélite en caso de que la atmósfera tuviera la distribución dada por el perfil modelado. De esta forma se puede realizar la comparación entre los datos observados por el instrumento satelital y los datos modelados tomando en cuenta la sensibilidad vertical de las mediciones satelitales.

Posteriormente, los kernels promedio del satélite fueron interpolados a las alturas del modelo en cada punto coincidente y los perfiles de CO modelados fueron suavizados usando la siguiente ecuación:

$$x_{modelo_suavizado} = A \cdot x_{modelo} + (1 - A) \cdot x_a \quad (7c)$$

donde

$x_{modelo_suavizado}$: Perfil del modelo suavizado

A : Kernel promedio interpolado a las alturas del modelo

x_{modelo} : Perfil original del modelo

En este trabajo, se usaron las columnas totales satelitales (dado que los datos de FORLI solo proveen la columna total y no el perfil) y las columnas totales modeladas (suma de las columnas parciales de cada capa).

Después, se generó una matriz K cuyas columnas corresponden a los datos del modelo suavizados (ecuación 7c) de cada una de las regiones. Sus filas indican el número de puntos coincidentes. Por lo tanto, para el caso 1: K (1074,6) y para el caso 2 y 3: K(1074,9).

La columna total de CO en cada punto coincidente y en el tiempo es una combinación lineal de la suma del monóxido de carbono de cada región. Esto se representa matemáticamente en las ecuaciones 8 y 9.

$$C_{co} = F_{Toluca} \cdot C_{T_{Toluca}} + F_{Ciudad\ de\ México} \cdot C_{T_{Ciudad\ de\ México}} + \dots + F_{Fondo} \cdot C_{T_{Fondo}} \quad (8)$$

$$C_{co_{suavizado}} - g(1 - A) \cdot x_a \\ = gA \cdot F_{Toluca} \cdot x_{Toluca} + gA \cdot F_{Ciudad\ de\ México} \cdot x_{Ciudad\ de\ México} + \dots \quad (9)$$

Donde

C_{co} : Columna total de monóxido de carbono

C_{T_i} : Columna de total de origen i

F_i : Factor de escalamiento para la región i

x_i : Perfil de CO proveniente de la región i

$C_{co_{suavizado}}$: Columna total de monóxido de carbono suavizada

A: Kernel promedio interpolado a las alturas del modelo

g: Operador de columna total (g= [1 1 1 1 ... 1])

La ecuación 8 establece que en un punto dado la columna total de CO es igual a la columna de CO proveniente de Toluca multiplicada por un factor más la columna CO proveniente de la Ciudad de México multiplicada por otro factor y así sucesivamente hasta sumar todas las regiones. Si consideramos que los factores son igual a 1, entonces estamos hablando de los resultados del modelo original, es decir, donde las emisiones no han sido escaladas.

Por otra parte, en este trabajo se usaron las columnas totales satelitales, por lo que se aplicó el operador de columna total ($g = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ \dots 1]$) para sumar todas las columnas parciales del modelo. Esto se expresa en la ecuación 9, donde se establece que la columna total de CO suavizado menos la contribución del *a priori* es igual a la suma de la columna de CO proveniente de cada una de las regiones multiplicado por un factor y por el perfil de los kernels promediados. De esta forma la comparación entre los valores del modelo y el satélite se realiza tomando en cuenta las características de sensibilidad vertical de las mediciones del satélite (kernel promediado).

En consecuencia, cada punto coincidente se puede representar como una ecuación con 6 o 9 incógnitas (dependiendo del número de regiones analizadas), es decir, que la columna satelital menos la contribución del *a priori* es igual a la suma de CO proveniente de cada región multiplicado por un factor desconocido y por los kernels promediados (ecuación 10). Dado que para este estudio se encontraron 1074 puntos coincidentes, entonces se cuenta con la misma cantidad de ecuaciones.

$$x_{sat} - g(1 - A_{sat})x_a = gA \cdot F_{Toluca} \cdot x_{Toluca} + gA \cdot F_{Ciudad\ de\ México} \cdot x_{Ciudad\ de\ México} + \dots \quad (10)$$

Finalmente, esto se representa matricialmente en la ecuación 11.

$$y = Kx \quad (11)$$

y : Vector que contiene las columnas totales del satélite en los puntos coincidentes.

x : Vector de escalamiento.

K : Matriz que contiene los valores de columna total modelados y suavizados de cada región para cada punto coincidente.

En este tipo de problemas donde existen más ecuaciones que incógnitas se busca una x que reduzca las diferencias entre Kx y y (es decir: $y - Kx$). Esto se resuelve

mediante mínimos cuadrados de acuerdo con la ecuación 12 (Rodgers, 2000; Ortega *et al.*, 2009):

$$C = (y - Kx)^T(y - Kx) \quad (12)$$

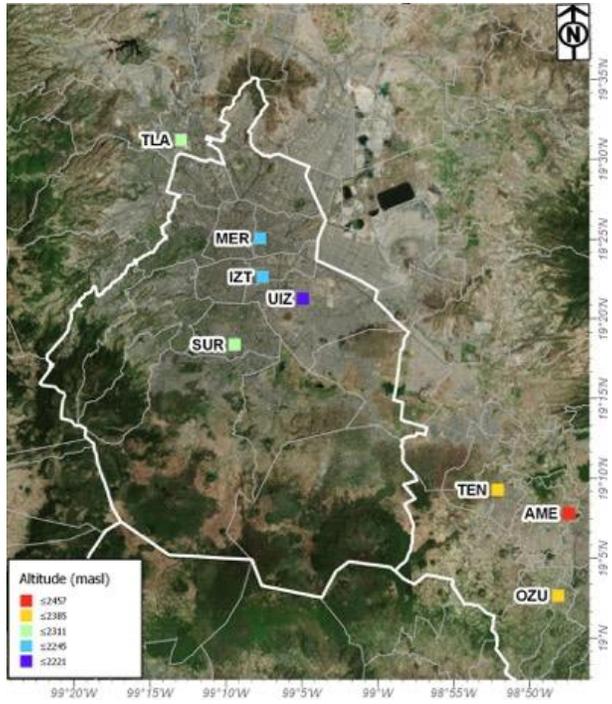
Derivando la ecuación 12 e igualando a cero resulta:

$$x = (K^T \cdot K)^{-1} \cdot K^T \cdot y' \quad (13)$$

Donde el vector x contiene los factores de escalamiento para cada región y cuyos valores deberían ser igual 1 para el caso ideal. Para valores superiores a 1 indica una subestimación de las emisiones en los inventarios originales, mientras que para valores inferiores una sobreestimación.

5.5 Comparación contra mediciones en superficie

Después de haber obtenido los factores de escalamiento mediante el análisis de las columnas modeladas y satelitales, se escalaron los inventarios multiplicando las emisiones originales de cada región por su respectivo factor de escalamiento, pero no sólo a las 10 a.m. sino a todos los tiempos. Posteriormente se modeló con las emisiones escaladas empleando el módulo de reacciones químicas del modelo. Estos nuevos resultados se utilizaron para comparar contra los valores medidos por la RAMA en las estaciones de Iztacalco (IZT), Merced (MER), Santa Úrsula (SUR), UIZ (UAM Iztapalapa) y Tlalnepantla (TLA), así como en los sitios de medición de una campaña realizada en el Estado de México (García-Yee *et al.*, 2017): Amecameca (AME), Tenango (TEN) y Ozumba (OZU) (Figura 5.4).



Fuente: Maldonado-Pacheco et al., 2021

Figura 5.4 Sitios de medición empleados para evaluar el desempeño del modelo en superficie

6.- RESULTADOS

En este apartado se muestran los resultados obtenidos del análisis de comparación de los datos satelitales contra los datos modelados para los tres casos siguientes:

- 1) Caso 1: 6 regiones de estudio empleando el inventario de emisiones 2008
- 2) Caso 2: 9 regiones de estudio utilizando el inventario de emisiones 2008
- 3) Caso 3: 9 regiones de estudio utilizando el inventario de emisiones 2014

Asimismo, en el Anexo 1 se muestran diagramas de dispersión y series de tiempo correspondientes a la evaluación de las variables meteorológicas que incluye la temperatura, la humedad relativa y las componentes meridional (U) y zonal del viento (V).

6.1 Caso de estudio 1: 6 regiones de estudio empleando el inventario de emisiones 2008

6.1.1 Factores de escalamiento y emisión total para el caso 1.

En la tabla 6.1 se presentan los factores de escalamiento y sus respectivas incertidumbres obtenidos para el *caso 1* en el cual se emplearon 6 regiones de estudio y los inventarios de emisiones 2008. Además, en la tabla 6.2 se muestran los valores de emisión total de cada región en teragramo/año tanto para los inventarios originales como para los escalados.

Se observó que, para la ZMVM, Toluca, Morelos y Puebla el factor de escalamiento fue menor a 1, lo cual se puede interpretar como una sobrestimación de las emisiones en los inventarios originales por lo que es necesario reducirlas. Para Hidalgo y la concentración de fondo, el factor de escalamiento fue mayor a 1 indicando una subestimación; en consecuencia, las emisiones necesitan incrementarse en esta región. También se observa que las incertidumbres más pequeñas se presentaron en la ZMVM y para la concentración de fondo mientras que las mayores se obtuvieron en Morelos e Hidalgo.

Tabla 6.1 Factores de escalamiento e incertidumbres para el caso 1

Región	Factor	Incertidumbre (%)
Ciudad de México y Área Metropolitana	0.39	5.71
Toluca	0.15	15.23
Morelos	0.17	52.0
Puebla	0.36	24.98
Hidalgo	1.56	44.07
Concentración de fondo	1.9	0.50

Tabla 6.2 Emisión total en Tg/año para el caso de estudio 1

Región	Original	Escalado
Ciudad de México y Área Metropolitana	2.76	1.08
Toluca	0.96	0.14
Morelos	0.60	0.10
Puebla	0.95	0.34
Hidalgo	0.18	0.28

6.1.2 Comparaciones de columna total entre el satélite y el modelo

La figura 6.1 muestra las diferencias entre los datos satelitales y los modelados utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios de emisiones del año 2008.

En general, el satélite observó valores de columna de CO más altos que los calculados por el modelo cuando se emplearon los inventarios originales, excepto en algunos puntos al norte de la Ciudad de México y en Estado de México donde esta tendencia se invierte (Figura 6.1a). Las diferencias entre el satélite y el modelo disminuyeron considerablemente en la mayor parte del dominio al utilizar los inventarios escalados (Figura 6.1b).

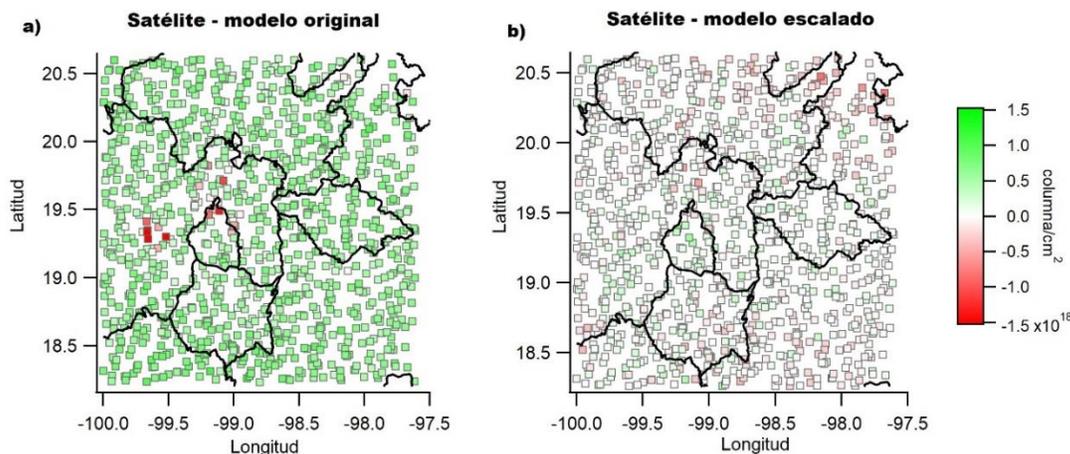


Figura 6.1 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios **a)** originales y **b)** escalados del año 2008 para el caso 1

Además, se realizó un ajuste lineal de los datos satelitales contra los datos modelados y se estimó el coeficiente de correlación (R), el índice de concordancia y el RMSE (raíz del error cuadrático medio) (Figura 6.2).

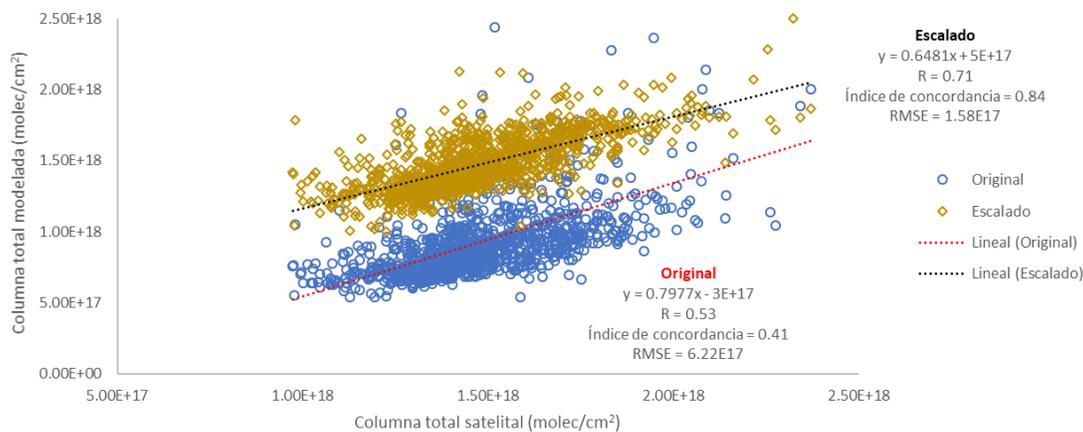


Figura 6.2 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2008 originales y escalados para el caso 1

Se observa que los valores de columna total del modelo fueron más altos al emplear las emisiones escaladas, acercándose a los datos reportados por el instrumento satelital y respaldando los resultados presentados en la figura 6.1. Además, la correlación de los datos aumentó de 0.53 a 0.71, el índice de concordancia

incrementó de 0.41 a 0.84 y el RMSE se redujo de $6.22E+17$ a $1.58E+17$ moléculas/cm² al usar los inventarios escalados.

6.1.3 Comparaciones contra mediciones en superficie

Se realizaron comparaciones del modelo contra mediciones en superficie a la hora del paso satelital (10 a.m.) para lo cual se utilizaron datos de observaciones de la RAMA, así como los datos de la campaña de medición llevada a cabo en Amecameca, Tenango y Ozumba para el periodo modelado (Garcia-Yee *et al.*, 2017).

6.1.3.1 Diagramas de caja y bigote

En la figura 6.3 se muestran los diagramas de caja y bigote para las concentraciones observadas de la RAMA, así como las concentraciones modeladas empleando el inventario original y el inventario escalado a la hora de análisis (10 a.m.). Al utilizar los inventarios originales, se observa que los valores máximos modelados sobrestimaron aproximadamente por un factor de 2 los valores máximos de las observaciones, pero una vez que las emisiones se escalaron, las diferencias se redujeron.

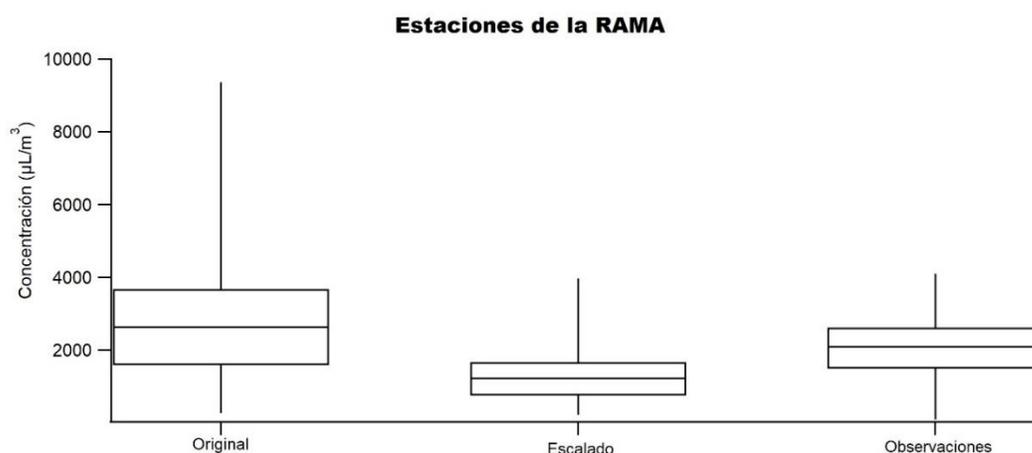


Figura 6.3 Comparación de los datos modelados y observados en superficie a las 10 a.m. para las estaciones de la RAMA (caso 1).

En la figura 6.4 se muestran los diagramas de caja para los sitios de medición en el Estado de México. Se observa que el modelo predijo valores más altos que las mediciones cuando se emplearon las emisiones originales, sin embargo, cuando se utilizaron las emisiones escaladas las diferencias entre el modelo y las observaciones disminuyeron.

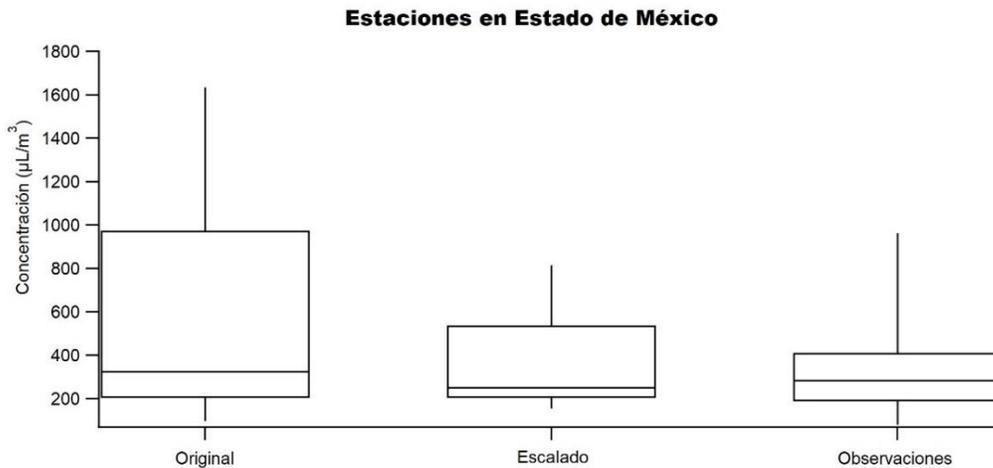


Figura 6.4 Comparación de los datos modelados y observados en superficie a las 10 a.m. para las estaciones del Estado de México (caso 1).

6.3.1.2 Estadísticos

En la tabla 6.3 se muestran los índices de concordancia (Willmott, 1981) calculados a las 10 a.m. para cada una de las estaciones empleando las emisiones originales y escaladas. Este estadístico es una medida estandarizada del grado de error de predicción del modelo en comparación con las observaciones. Puede variar de 0, en cuyo caso no hay acuerdo, a 1, donde el acuerdo es perfecto.

Se observa que para la mayoría de las estaciones de la RAMA como para los sitios de medición en el Estado de México el índice de concordancia incrementó cuando se utilizaron las emisiones escaladas lo cual se traduce en una mejora en el desempeño del modelo. El valor más bajo se presentó en la estación de Ozumba empleando las emisiones originales, mientras que el valor más alto se estimó en la estación de Iztacalco usando las emisiones escaladas.

Tabla 6.3 Índice de concordancia para los sitios de medición (caso 1).

Estación	Original	Escalado
Iztacalco	0.58	0.75
Merced	0.43	0.68
Santa Úrsula	0.60	0.57
Tlalnepantla	0.42	0.67
UAM Iztapalapa	0.62	0.52
Amecameca	0.37	0.55
Tenango	0.41	0.58
Ozumba	0.36	0.62

En la tabla 6.4 se presentan los valores del RMSE calculados en unidades de mL/m^3 (ppmv) para los mismos sitios de medición que la tabla 6.3. Para un caso ideal el RMSE adquiere el valor de 0, por lo que en cuanto más pequeño sea el valor de este estadístico, las diferencias entre el modelo y las observaciones serán menores.

Se observa que empleando los inventarios escalados se redujo el error en la mayoría de los sitios de medición. Los valores más altos de este estadístico se calcularon en la estación de Merced e Iztacalco utilizando las emisiones originales mientras que los más bajos se estimaron en Ozumba y Amecameca usando las emisiones escaladas. Estos resultados también indican una mejora en el desempeño del modelo a la hora de análisis. En la estación de UAM Iztapalapa se encontró la tendencia opuesta, disminuyó el índice de concordancia y aumentó el RMSE. Este resultado puede estar asociado a factores locales que afectan la concentración de CO en este sitio.

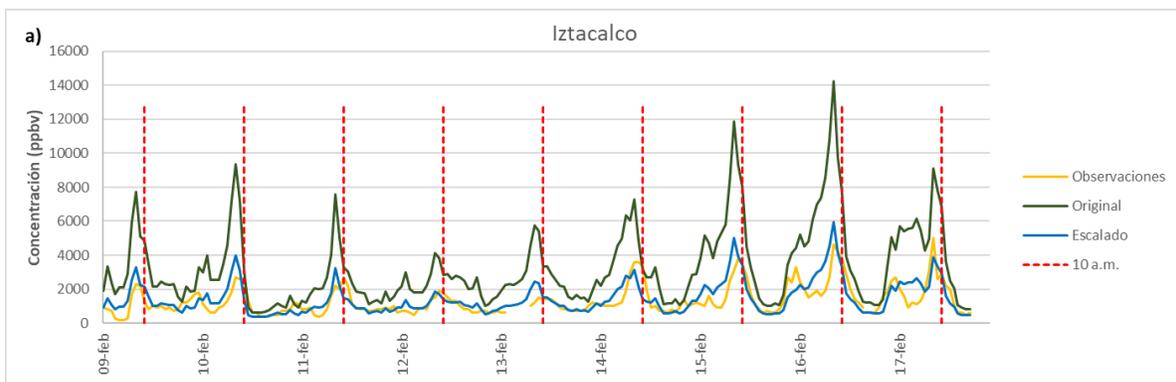
Tabla 6.4. RMSE (en mL/m^3) para los sitios de medición (caso 1).

Estación	Original	Escalado
Iztacalco	1.98	0.90
Merced	2.46	1.04
Santa Úrsula	1.22	0.98
Tlalnepantla	1.76	0.75
UAM Iztapalapa	1.33	1.52
Amecameca	0.42	0.20
Tenango	0.63	0.29
Ozumba	0.38	0.14

6.3.1.3 Series de tiempo

En la figura 6.5 se muestran series de tiempo del 9 al 17 de febrero para las estaciones de medición de la red de monitoreo de la RAMA. La línea amarilla corresponde a las observaciones, la línea verde representa los resultados del modelo empleando las emisiones originales y la línea azul utilizando las emisiones escaladas. Además, la línea roja punteada señala las 10 a.m., hora a la cual se realizó la comparación contra las mediciones satelitales.

Se observa que, al usar las emisiones originales, el modelo sobrestimó las observaciones en las estaciones de Iztacalco, Merced, Santa Úrsula y Tlalnepantla, pero cuando se emplearon las emisiones escaladas los resultados del modelo se acercaron a las mediciones, especialmente en los valores máximos observados. En UAM Iztapalapa, se presentaron días (10,14,16 y 17 de febrero) en los cuales los resultados del modelo usando emisiones originales fueron más cercanos a los reportados por la RAMA, pero en algunos otros (9, 12 y 13 de febrero) donde las diferencias fueron menores al alimentar al modelo con las emisiones escaladas. Esto sugiere que existen factores locales que afectan la concentración de CO en este sitio, los cuales pueden estar relacionados con las emisiones o la meteorología locales.



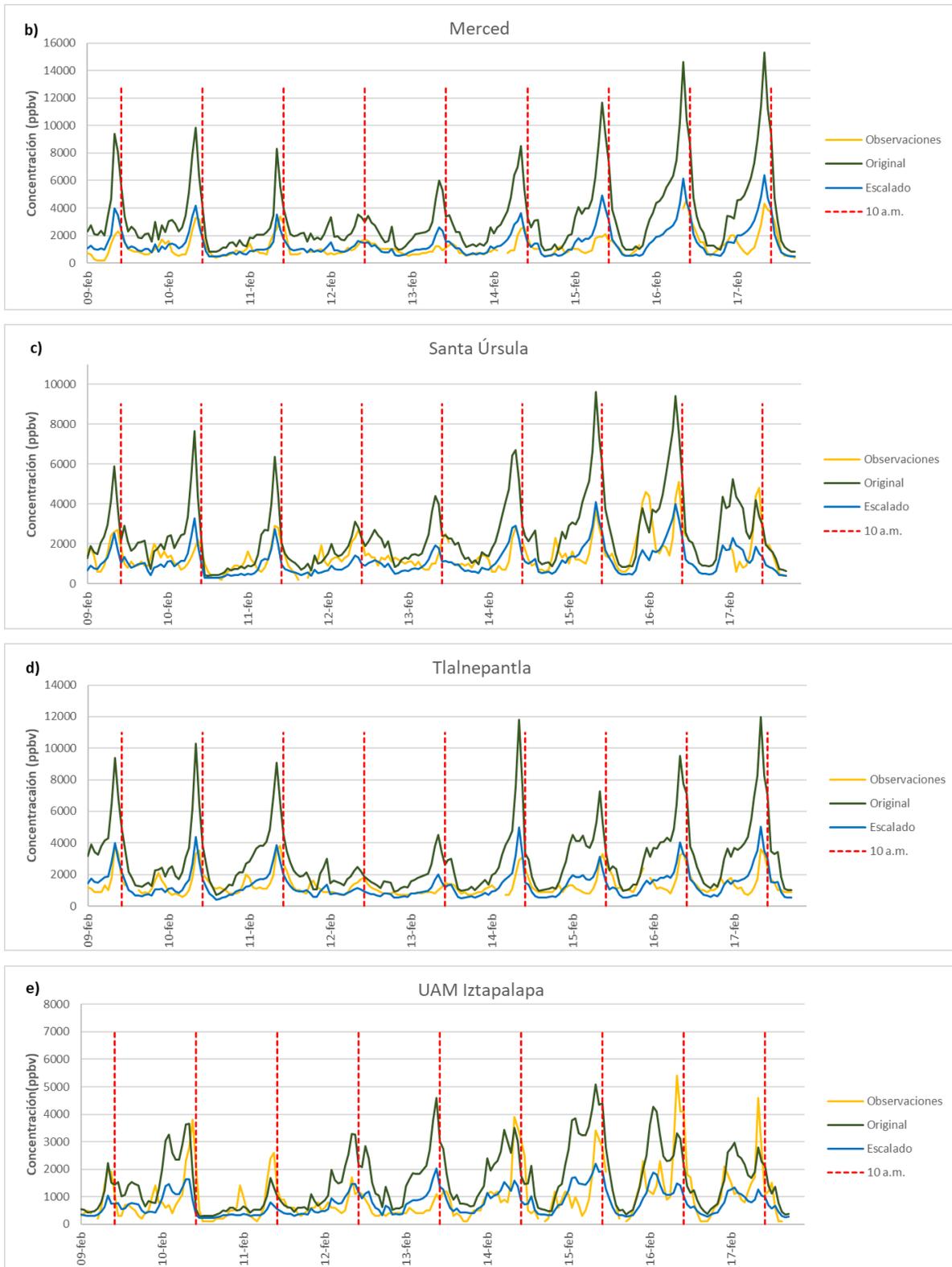
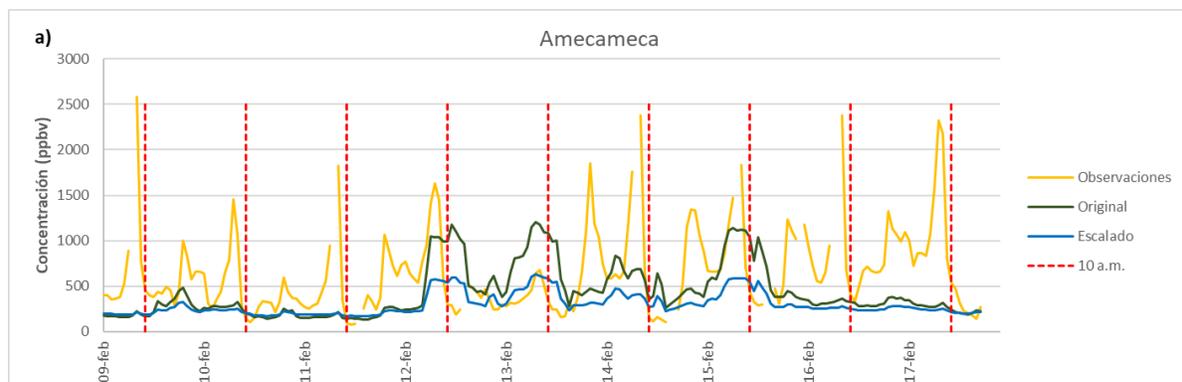


Figura 6.5 Series de tiempo para las estaciones de la RAMA (IZT, MER, SUR, TLA, UIZ) comparando las observaciones contra el modelo empleando 6 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008.

En la figura 6.6 se presentan las series de tiempo del 9 al 17 de febrero para los sitios de medición de la campaña realizada en el Estado de México.

Para Amecameca y Ozumba se encontró que las concentraciones observadas son mayores que los resultados de las modelaciones al utilizar las emisiones originales y escaladas. En general, ambas concentraciones modeladas fueron similares, pero en ciertos días (del 13 al 15 de febrero) son mayores aquellas que utilizaron las emisiones originales, las cuales cuentan con puntos máximos de concentración definidos que disminuyeron su intensidad al emplear las emisiones escaladas. Ahora bien, analizando solamente los puntos a las 10 a.m. el modelo escalado se acercó más a las mediciones lo cual se apoya con los valores estimados de los estadísticos en las tablas 6.3 y 6.4.

Para Tenango, la tendencia del modelo fue sobrestimar las observaciones en los valores mínimos empleando tanto los inventarios originales como escalados. Sin embargo, en los valores máximos el modelo estimó mayores concentraciones que las mediciones cuando se usó el inventario original y se acercó a los datos observados utilizando el inventario escalado. Estas diferencias indican que el modelo tiene dificultades para estimar la concentración de CO en estos sitios en horas distintas a las 10 a.m. (cálculo del factor de escalamiento), lo cual puede estar relacionado con las emisiones o meteorología local.



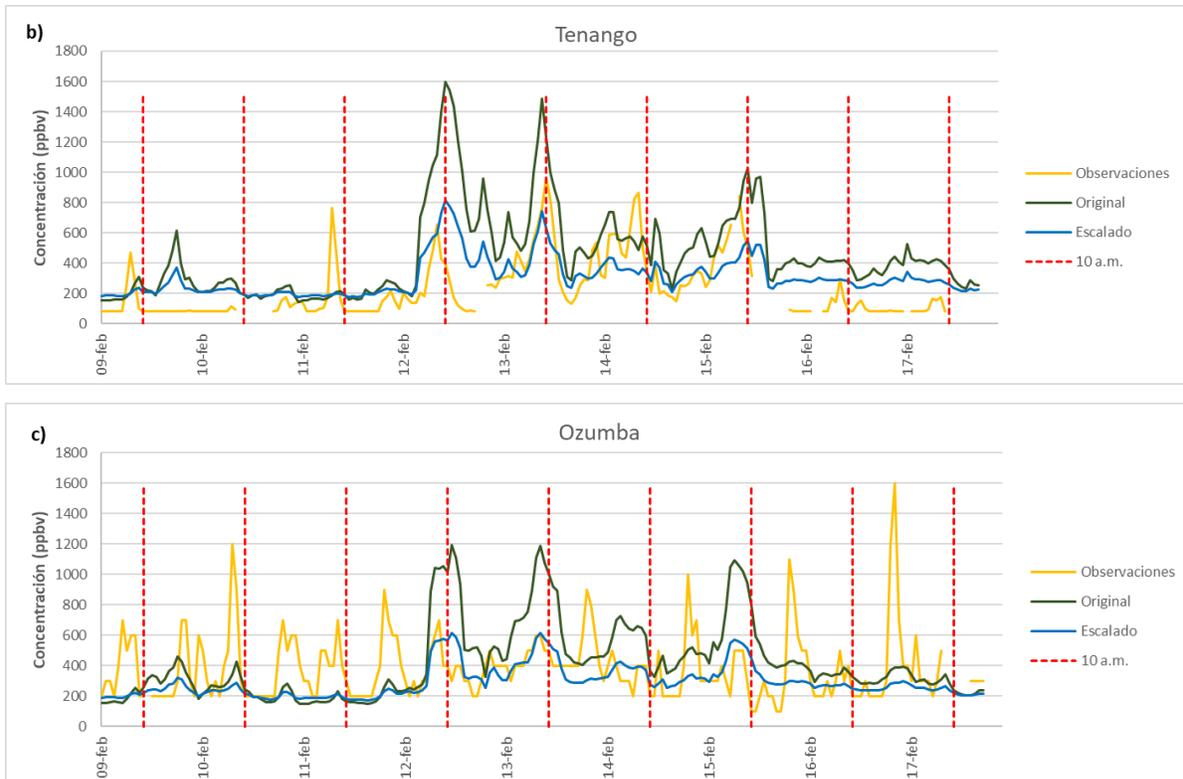


Figura 6.6 Series de tiempo para los sitios de medición en el Estado de México (AME, TEN y OZU) comparando las observaciones contra el modelo empleando 6 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008.

6.2 Caso de estudio 2 y 3: 9 regiones empleando inventarios de emisiones 2008 y 2014 respectivamente.

6.2.1 Factores de escalamiento y emisión total para los casos 2 y 3.

En la tabla 6.5 se muestran los factores de escalamiento e incertidumbres estimados para el caso 2 y 3 donde se utilizaron 9 regiones de estudio empleando los inventarios de emisiones 2008 y 2014 para modelar el mes de febrero del año 2011.

Table 6.5 Factores de escalamiento e incertidumbres para los casos 2 y 3

Región	Factor Inventario 2008	Incertidumbre (%) (Inv 2008)	Factor Inventario 2014	Incertidumbre (%) (Inv 2014)
Ciudad de México	0.49	10.48	0.80	7.19
Toluca	0.13	14.77	1.09	13.27
Morelos	0.16	64.32	0.93	19.04
Puebla	0.41	28.96	0.67	15.03
Hidalgo	3.26	36.20	1.13	3.77
Estado de México	0.29	16.47	1.60	18.41
Tlaxcala	1.15	60.87	0.66	19.37
Región sobrante	0.18	77.68	0.24	18.14
Concentración de fondo	1.86	0.69	1.90	0.94

Para el caso 2, se obtuvo un factor de escalamiento de 0.49 para la Ciudad de México, lo cual implica que las emisiones deberían reducirse a aproximadamente la mitad en esta región. Para Toluca, Morelos, Estado de México, y la región sobrante también se calcularon factores de escalamiento menores a uno traduciéndose en una sobrestimación de las emisiones en los inventarios originales mientras que para Hidalgo, Tlaxcala y la concentración de fondo los factores fueron mayores a uno, lo cual está asociado con una subestimación en las emisiones originales.

Para el caso 3, donde se utilizó el inventario de emisiones 2014, se obtuvieron factores de escalamiento más cercanos a la unidad (comparado con los resultados del caso 2) para las regiones de la Ciudad de México, Toluca, Morelos e Hidalgo. Para Puebla, Tlaxcala y la región sobrante los factores de escalamiento son menores a 0.7, indicando una sobrestimación de las emisiones en los inventarios

originales mientras que para el Estado de México y la concentración de fondo se estimaron factores mayores a 1, lo cual está relacionado con una subestimación de las emisiones.

En la tabla 6.6 se muestran las emisiones totales escaladas para cada una de las regiones en teragramo/año, así como el cociente entre ambos inventarios. Las regiones con los valores de emisiones más altos son la Ciudad de México y el Estado de México mientras que Tlaxcala, Morelos e Hidalgo presentan los valores más bajos. En general, se estimaron valores similares de emisión empleando tanto el inventario escalado del año 2008 como el escalado del 2014 con diferencias menores al 25% y con un muy buen acuerdo para la Ciudad de México, Estado de México y Puebla donde los errores asociados no son mayores al 7%. Sin embargo, en la región de Hidalgo, las emisiones escaladas difieren en aproximadamente 87%, aun cuando los factores de escalamiento calculados son mayores que 1 en ambos casos.

Tabla 6.6 Emisiones totales escaladas en Tg/año para los casos 2 y 3

Región	Inventario escalado 2008	Inventario escalado 2014	Cociente (2014/2008)
Ciudad de México	0.56	0.53	0.93
Toluca	0.17	0.21	1.20
Morelos	0.07	0.09	1.22
Puebla	0.19	0.18	0.94
Hidalgo	0.23	0.03	0.13
Estado de México	0.47	0.50	1.06
Tlaxcala	0.09	0.10	1.12
Región sobrante	0.28	0.22	0.80
Total	2.07	1.86	0.90

6.2.2 Comparaciones de columna total entre el satélite y el modelo

6.2.2.1 Caso 2

En figura 6.7a, se muestra la diferencia entre la columna total del satélite y el modelo en los puntos coincidentes utilizando los inventarios de emisiones originales 2008. Se encontró que en la mayor parte del dominio las columnas satelitales fueron mayores (color verde) que las modeladas mientras que en regiones cercanas a Toluca y en el norte de la Ciudad de México se encuentran puntos donde los valores de columna total del modelo fueron más altos.

En la figura 6.7b, se muestra la diferencia de columnas totales entre el satélite y el modelo, pero a diferencia de la figura 6.7a, las emisiones fueron escaladas con los factores de escalamiento reportados en la tabla 6.5. Se encontró que las diferencias disminuyeron en la mayor parte del dominio por lo que los valores de columna del modelo se aproximaron a los satelitales.

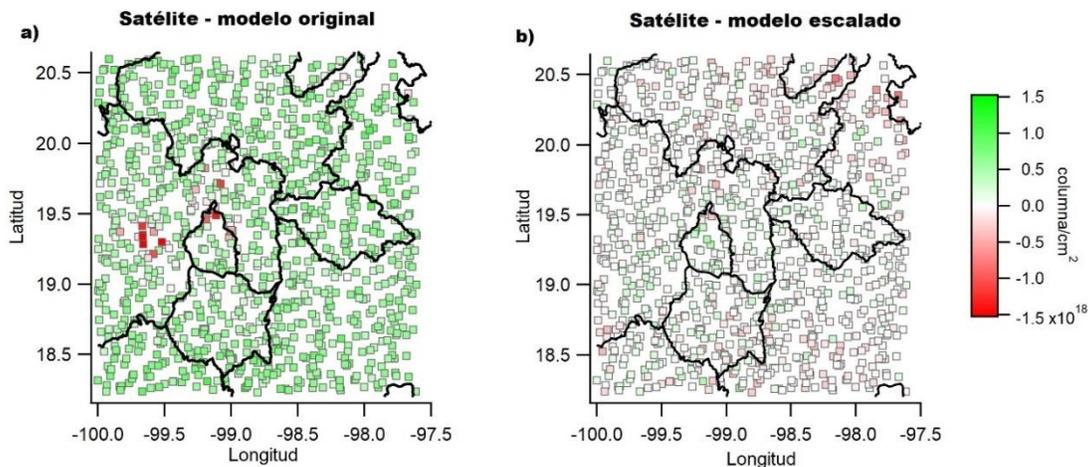


Figura 6.7 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios **a)** originales y **b)** escalados del año 2008 para el caso 2

En la figura 6.8 se muestra el diagrama de dispersión y el ajuste lineal comparando los datos satelitales con los resultados del modelo empleando los inventarios originales y escalados del año 2008. Se observa que la correlación incrementó de 0.50 a 0.72, el índice de concordancia aumentó de 0.43 a 0.84 y el RMSE disminuyó de 5.96E+17 a 1.56E+17 moléculas/cm², al utilizar las emisiones escaladas. Esto

indica que los valores de columna del modelo se acercaron a los observados por el satélite por lo que el desempeño del modelo mejoró.

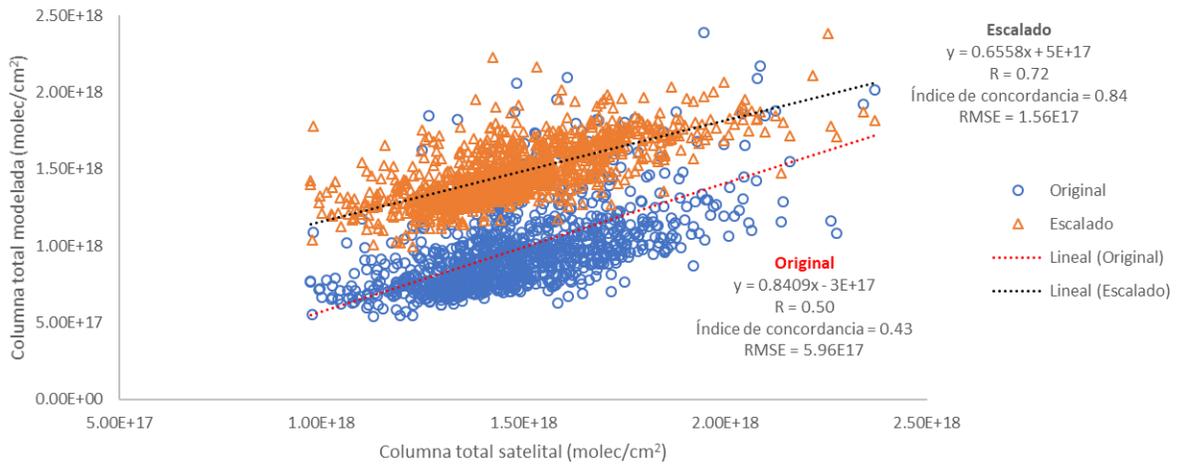


Figura 6.8 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2008 originales y escalados para el caso 2.

6.2.2.2 Caso 3

En la figura 6.9a, se muestra la diferencia entre los datos satelitales y modelados utilizando los inventarios de emisiones originales del año 2014. Los valores de columna satelitales fueron mayores que los del modelo en todo el dominio y, además, no existen puntos donde los datos del modelo sean mayores que los del satélite, lo cual puede deberse a los distintos métodos utilizados para calcular las emisiones en los inventarios 2008 y 2014.

Por otra parte, en la figura 6.9b, se presentan las diferencias entre el satélite y el modelo empleando las emisiones escaladas 2014. Se encontró que las diferencias entre las columnas modeladas y las observadas disminuyeron al aplicar los factores de escalamiento a las regiones de estudio.

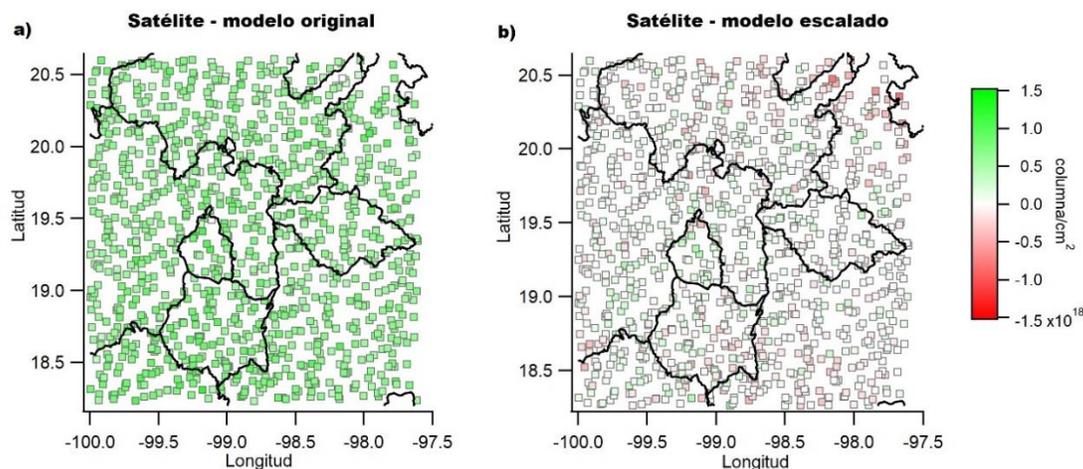


Figura 6.9 Diferencia entre el satélite y el modelo empleando los inventarios **a)** originales y **b)** escalados del año 2014 para el caso 3.

En la figura 6.10 se muestra el diagrama de dispersión y el ajuste lineal para el caso 3. La correlación aumentó ligeramente de 0.70 a 0.71, el índice de concordancia aumentó de 0.36 a 0.84 y el RMSE disminuyó de $6.73E+17$ a $1.57E+17$ moléculas/cm² al emplear las emisiones escaladas. Por lo tanto, los valores de columna total del modelo se aproximaron a los valores reportados por el instrumento satelital, mejorando el desempeño del modelo.

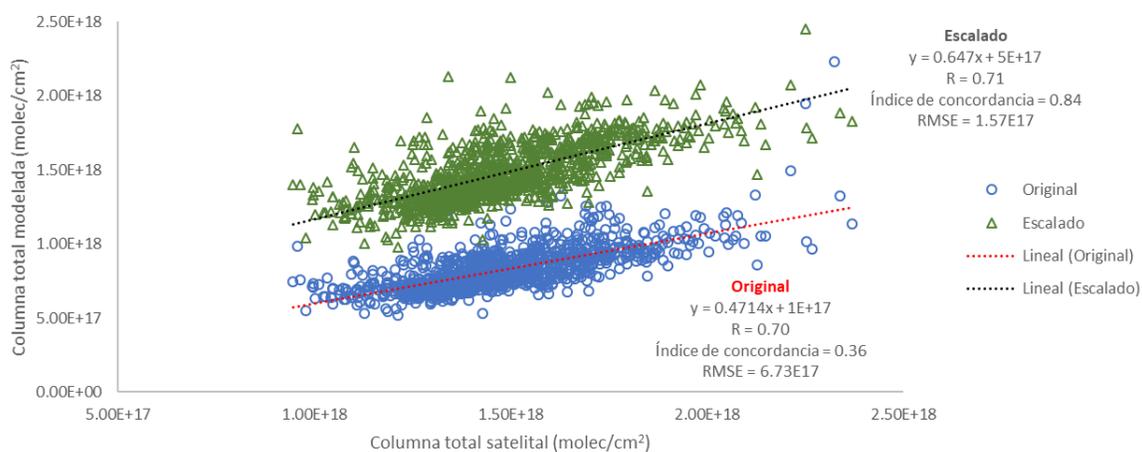


Figura 6.10 Diagrama de dispersión comparando los datos del satélite y el modelo empleando los inventarios del año 2014 originales y escalados para el caso 3.

6.2.3 Comparaciones de columna medidas en superficie contra columnas modeladas

6.2.3.1 Caso 2

En la figura 6.11 se observa el ajuste lineal y la correlación entre los datos de columna medidos en el Centro de Ciencias de la Atmósfera (UNAM) y los datos modelados con el modelo WRF-Chem usando el inventario de emisiones 2008 original. La figura 6.12 muestra de forma análoga un análisis similar, pero con los resultados del modelo empleando las emisiones escaladas del 2008. Se encontró que el RMSE se reduce de $1.27\text{E}+18$ a $4.61\text{E}+17$ moléculas/cm² y el índice de concordancia aumenta de 0.41 a 0.68 al emplear las emisiones escaladas del 2008. Además, la correlación aumenta de 0.52 a 0.55 al utilizar los inventarios escalados.

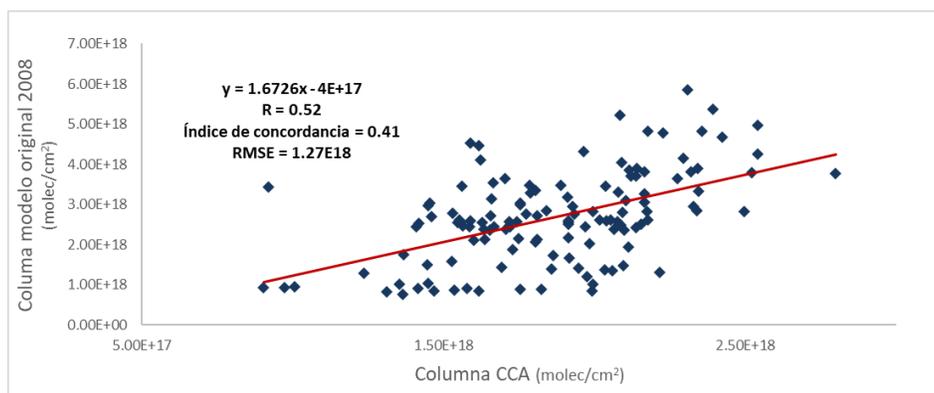


Figura 6.11 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario original 2008.

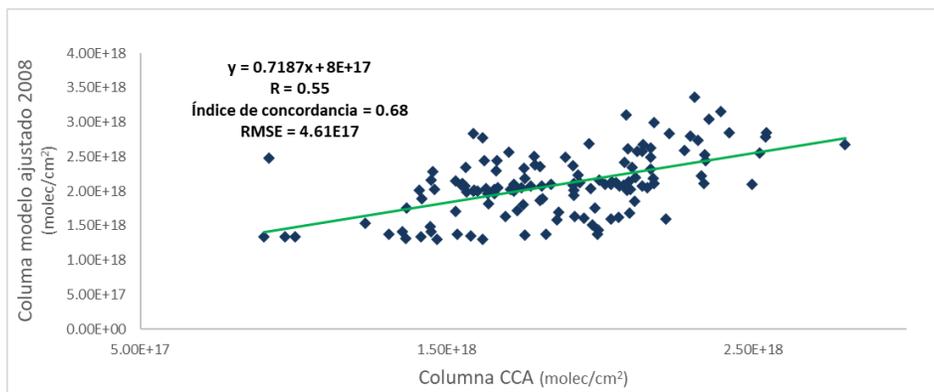


Figura 6.12 Comparación de columnas medidas en superficie contras las columnas modeladas empleando el inventario escalado 2008.

6.2.3.2 Caso 3

En las figuras 6.13 y 6.14, se muestran los ajustes lineales y las correlaciones correspondientes a las emisiones originales y escaladas del 2014. Se encontró que el valor de RMSE disminuye de $5.59\text{E}+17$ a $4.41\text{E}+17$ moléculas/cm², el índice de concordancia aumenta de 0.60 a 0.68 y la correlación incrementa de 0.44 a 0.49 al emplear las emisiones escaladas.

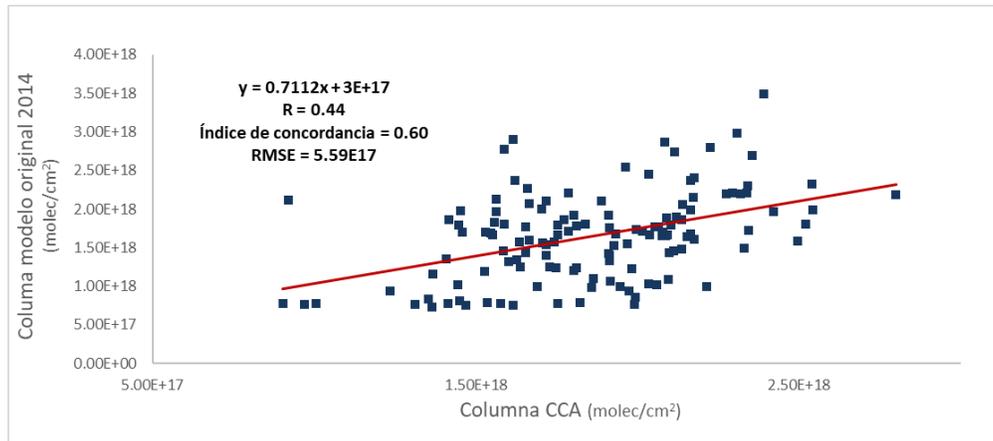


Figura 6.13 Comparación de columnas medidas en superficie contra las columnas modeladas empleando el inventario original 2014.

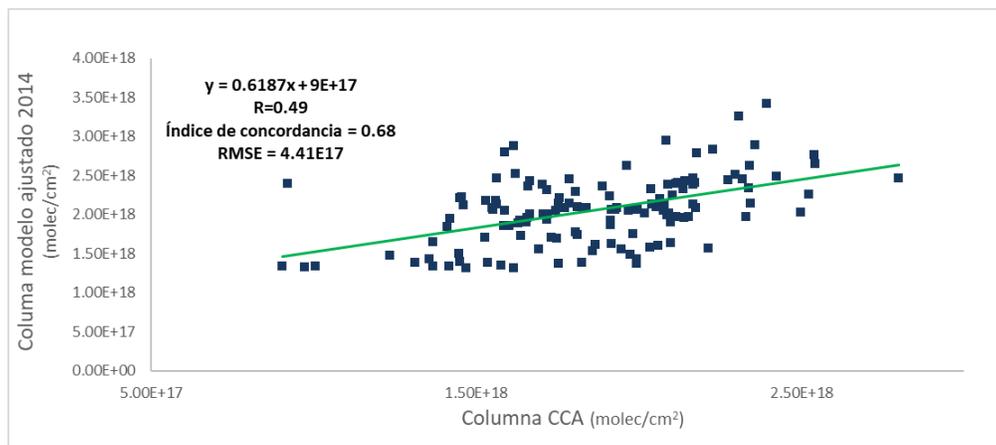


Figura 6.14 Comparación de columnas medidas en superficie contra las columnas modeladas empleando el inventario escalado 2014.

6.2.4 Comparación contra mediciones en superficie

Asimismo, se evaluó el desempeño del modelo a nivel de superficie comparando los resultados del modelo contra observaciones de la RAMA y datos obtenidos en la campaña de medición llevada a cabo en Amecameca, Tenango y Ozumba para el periodo modelado (Garcia-Yee *et al.*, 2017).

6.2.4.1 Gráficos de caja y bigote

En la figura 6.15 se muestran los diagramas de caja y bigote para las observaciones de la RAMA y los resultados del modelo a las 10 a.m. utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios 2008 y 2014.

Se observa que el modelo generó concentraciones de monóxido de carbono más altas que las reportadas por la RAMA al emplear las emisiones originales del inventario 2008; sin embargo, al utilizar las emisiones escaladas se redujeron las diferencias entre lo observado y lo modelado. En cuanto a las concentraciones modeladas con las emisiones del 2014, se estimaron valores semejantes empleando tanto los inventarios originales como los escalados, los cuales se encuentran en el rango de los datos observados.

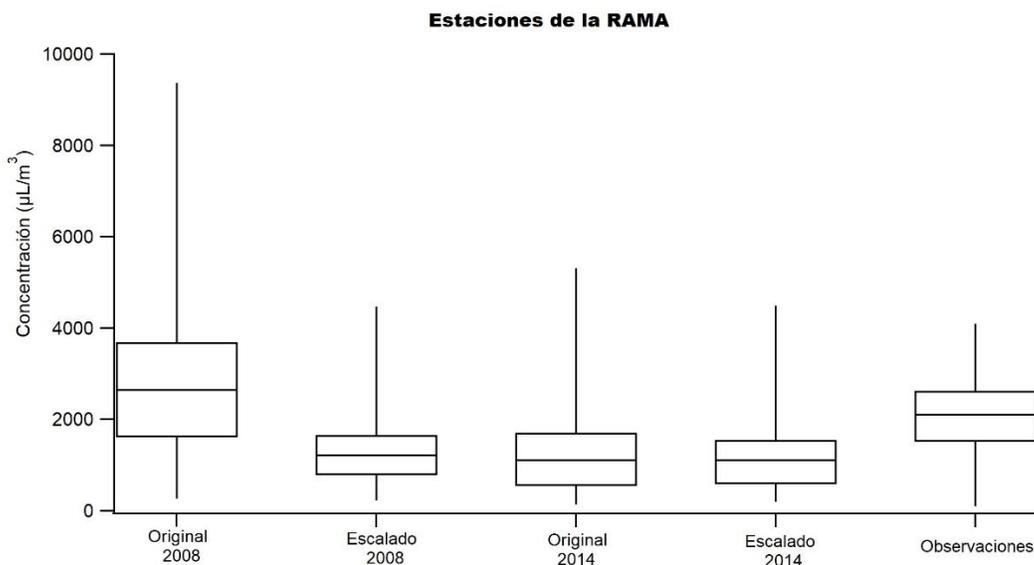


Figura 6.15 Comparación de datos de la RAMA contra datos modelados utilizando emisiones originales y escaladas de los inventarios 2008 y 2014.

En la figura 6.16 se presenta los diagramas de caja y bigote de forma análoga a la figura 6.15 pero utilizando las mediciones realizadas en el Estado de México.

En el caso del inventario 2008, las emisiones originales produjeron concentraciones más altas que las mediciones, pero las diferencias se redujeron cuando se utilizaron las emisiones escaladas. En cuanto al inventario 2014, el modelo predijo concentraciones similares utilizando tanto el inventario original como el escalado, y en ambos casos cercanas a las observaciones.

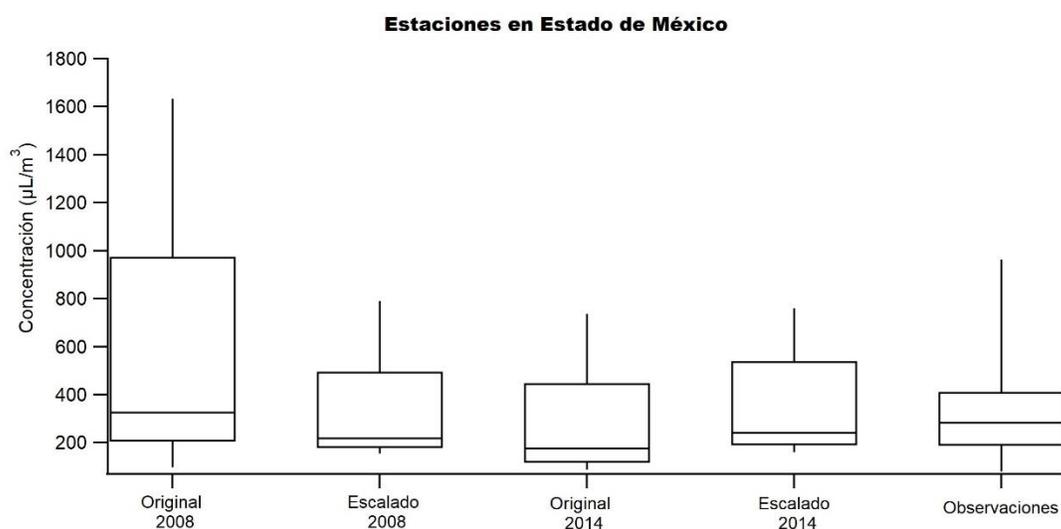


Figura 6.16 Comparación de datos del Estado de México contra datos modelados utilizando emisiones originales y escaladas de los inventarios 2008 y 2014.

6.2.4.2 Estadísticos

Las tablas 6.7 y 6.8 muestran el índice de concordancia y el RMSE respectivamente correspondientes a los casos 2 y 3 para los sitios de medición a las 10 a.m.

Respecto al índice de concordancia, se encontró que para el inventario 2008 aumentó en la mayoría de los sitios de medición cuando se usaron las emisiones escaladas mejorando el desempeño del modelo. En cuanto al inventario 2014, se estimaron valores del índice de concordancia similares empleando tanto las emisiones originales como las escaladas, lo cual podría deberse a que las

emisiones originales de este inventario son más cercanas a las reales para este periodo.

También es importante resaltar que los valores más bajos del índice se estimaron utilizando las emisiones originales del año 2008. Asimismo, los valores de este estadístico son similares empleando las emisiones originales 2014, escaladas 2014 o escaladas 2008 lo cual se debe a que los valores de concentración de CO calculados por el modelo son similares.

Tabla 6.7 Índice de concordancia para los sitios de medición en los casos 2 y 3.

<i>Estación/Sitio</i>	Original 2008	Escalado 2008	Original 2014	Escalado 2014
Iztacalco	0.58	0.78	0.79	0.76
Merced	0.43	0.69	0.71	0.71
Santa Úrsula	0.60	0.61	0.47	0.45
Tlalnepantla	0.42	0.60	0.51	0.56
UAM Iztapalapa	0.62	0.52	0.53	0.52
Amecameca	0.37	0.54	0.53	0.55
Tenango	0.41	0.60	0.65	0.61
Ozumba	0.36	0.65	0.61	0.58

Para el RMSE, se observó que para el inventario 2008 los valores más altos se obtuvieron cuando se emplearon las emisiones originales pero una vez escaladas su valor disminuyó en la mayoría de las estaciones, con excepción de UAM Iztapalapa. En cuanto a los resultados usando los inventarios del año 2014, se muestra que las diferencias fueron mínimas cuando se utilizaron tanto las emisiones originales como las escaladas. Esto concuerda con el índice de concordancia mostrado en la tabla 6.7, el cual varió ligeramente en la mayoría de las estaciones y cuyos valores son semejantes a los obtenidos al emplear las emisiones escaladas del 2008.

Tabla 6.8 RMSE (en mL/m³) para los sitios de medición en los casos 2 y 3.

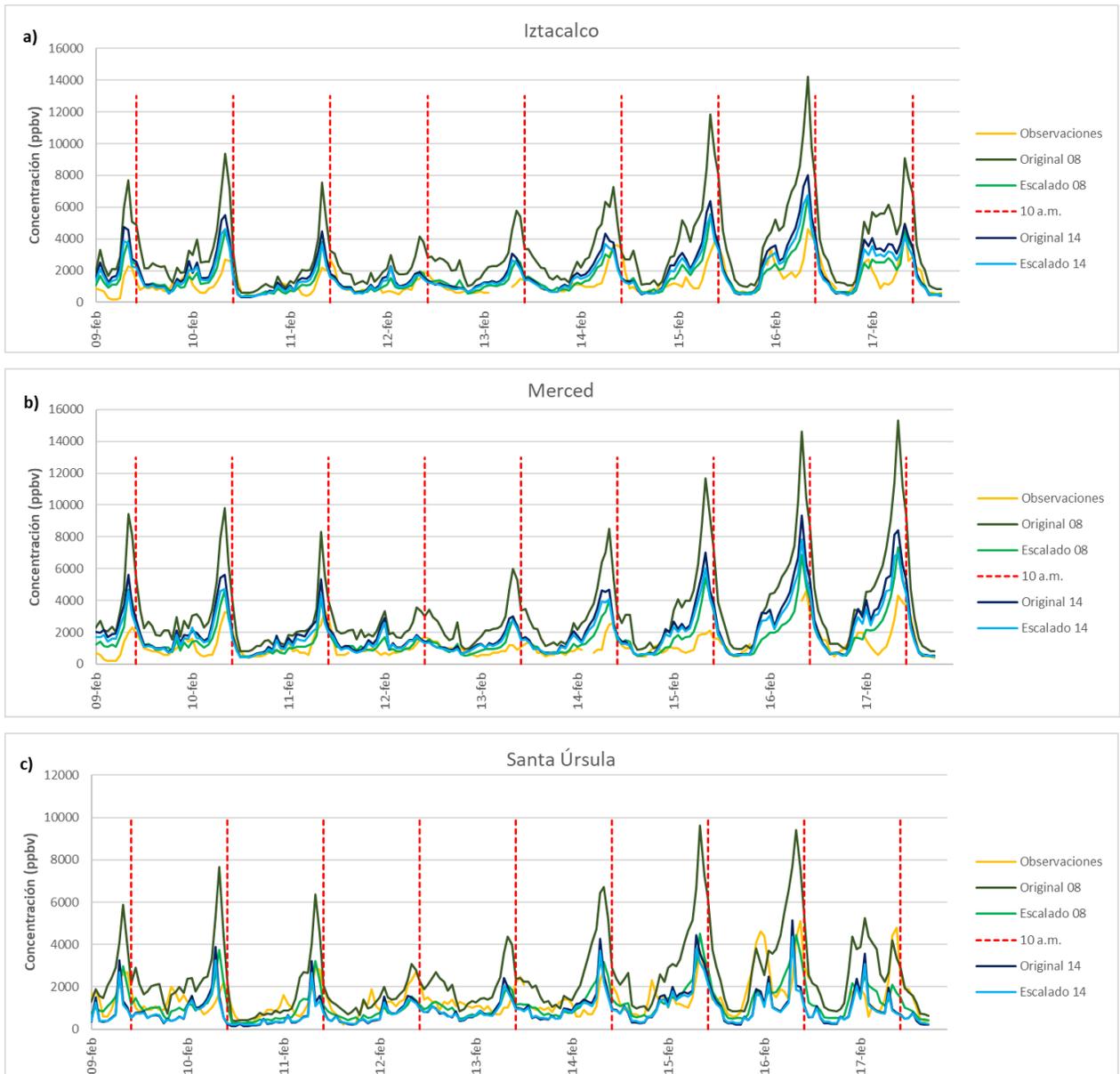
Estación/Sitio	Original 2008	Escalado 2008	Original 2014	Escalado 2014
Iztacalco	1.98	0.86	0.86	0.89
Merced	2.46	1.03	1.06	0.99
Santa Úrsula	1.22	0.90	1.28	1.30
Tlalnepantla	1.76	0.90	1.16	1.02
UAM Iztapalapa	1.33	1.50	1.50	1.51
Amecameca	0.42	0.21	0.24	0.21
Tenango	0.63	0.28	0.26	0.29
Ozumba	0.38	0.13	0.15	0.16

6.2.4.3 Series de tiempo

En la figura 6.17 se muestran series de tiempo del 9 al 17 de febrero comparando las observaciones de la RAMA contra los resultados del modelo empleando las emisiones originales y escaladas de los inventarios de 2008 y 2014. La línea con color verde oscuro representa el modelo usando emisiones originales del año 2008; la línea con color verde claro, el modelo empleando emisiones escaladas del año 2008; la línea de color azul oscuro, el modelo usando emisiones originales del año 2014 y la línea de color azul claro el modelo empleando emisiones escaladas del año 2014.

Para Iztacalco, Merced, Santa Úrsula y Tlalnepantla el modelo predijo concentraciones más altas que las observaciones cuando se emplearon las emisiones originales del 2008, pero utilizando las emisiones escaladas las concentraciones modeladas se aproximaron a mediciones de la RAMA. En cuanto a los resultados del modelo utilizando las emisiones del 2014, se obtuvieron valores similares empleando tanto las emisiones originales como las escaladas, respaldando los valores estimados de los estadísticos. Es importante señalar que no se observaron grandes diferencias entre los resultados modelados utilizando el inventario escalado 2008, el inventario original 2014 o el inventario escalado 2014, lo cual coincide con los valores de los estadísticos calculados en las tablas 6.7 y 6.8.

En UAM Iztapalapa, se encontraron días (10, 14, 16 y 17 de febrero) en los que el modelo original 2008 fue más cercano a las observaciones, pero también otros (9, 12 y 13 de febrero) en donde los modelos escalados (2008 y 2014) y el original del 2014 fueron más cercanos a las mediciones, sugiriendo la existencia de factores locales que afectan la concentración de CO en este sitio.



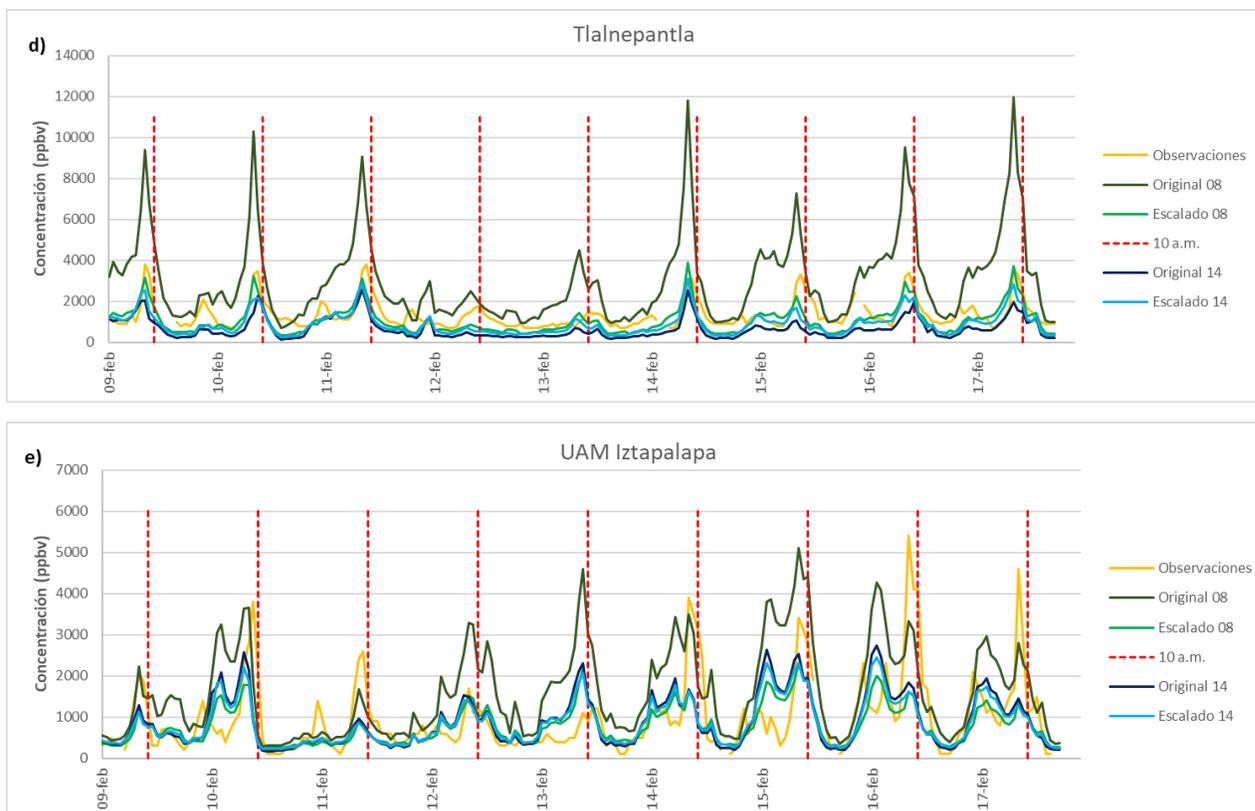


Figura 6.17 Series de tiempo para las estaciones de la RAMA (IZT, MER, SUR, TLA, UIZ) comparando las observaciones contra el modelo empleando 9 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008 y 2014.

En la figura 6.18, análoga a la figura 6.17, se muestran las series de tiempo para los sitios de medición en el Estado de México para los casos 2 y 3.

Para Amecameca y Ozumba, la tendencia de los datos modelados fue subestimar las mediciones, pero existen algunas horas donde el modelo predijo concentraciones más altas, sobre todo cuando se empleó el inventario original 2008. Además, se obtuvieron resultados similares empleando tanto los inventarios escalados 2008 así como los originales y escalados 2014 en todo el periodo de análisis.

En el caso de Tenango, el modelo sobrestimó los valores mínimos medidos, sin embargo, en el periodo comprendido entre el 13 al 15 de febrero reprodujo el incremento en la concentración y su variación. Resaltan las concentraciones

modeladas obtenidas empleando las emisiones originales 2008, dado que son las más altas mientras que las tres modelaciones restantes generaron concentraciones similares.

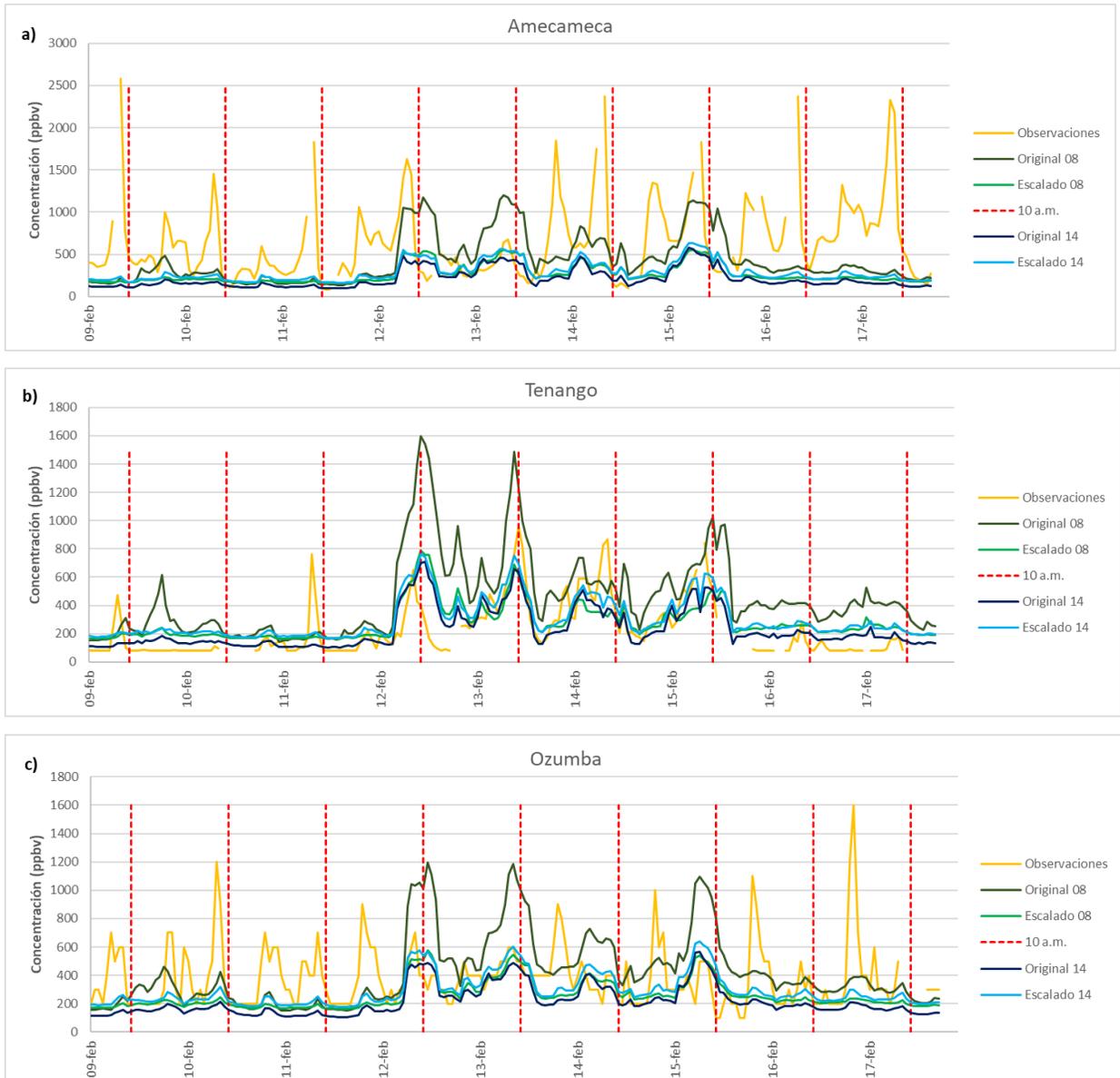


Figura 6.18 Series de tiempo para los sitios de medición en el Estado de México (AME, TEN y OZU) comparando las observaciones contra el modelo empleando 9 regiones de estudio y utilizando las emisiones originales y escaladas de los inventarios del año 2008 y 2014.

7.- ANÁLISIS DE RESULTADOS

En el caso 1, donde se hizo el análisis para 6 regiones del dominio modelado, se encontró que al escalar las emisiones las diferencias entre el satélite y el modelo se redujeron y en superficie el desempeño del modelo mejoró (a las 10 a.m.) dado que el índice de concordancia aumentó y el RMSE disminuyó en la mayoría de los sitios de medición.

En el caso 2 y 3, donde se compararon los inventarios 2008 y 2014 para 9 regiones del dominio modelado, también se observó que las diferencias entre el satélite y el modelo se redujeron cuando se emplearon las emisiones escaladas. Al comparar los resultados del modelo contra mediciones en superficie, el modelo generó concentraciones más altas empleando las emisiones originales del inventario 2008 mientras que usando las emisiones originales del inventario 2014 se obtuvieron concentraciones más cercanas a las observadas. Por lo que, considerando solamente las emisiones originales, el mejor desempeño del modelo se consiguió con el inventario 2014. En cuanto a las emisiones escaladas, se encontró que con ambos inventarios se obtuvieron concentraciones similares en superficie.

Asimismo, mientras que para el inventario 2008 los factores de escalamiento produjeron una reducción importante en las concentraciones modeladas en superficie, para el inventario 2014 variaron ligeramente. Por ejemplo, para el inventario 2008, el RMSE disminuyó hasta 1.43 ppmv (en Merced) y el índice de concordancia tuvo un incremento de 0.29 (en Ozumba); mientras que para el inventario 2014 los cambios en el RMSE y en el índice de concordancia se cuentan en escalas de décimas y centésimas respectivamente. Estos resultados indican que los valores de las emisiones originales 2008 se encontrarían más alejadas de los datos reales para el periodo de análisis.

Con relación a las series de tiempo, se observó que a la hora de comparación (10 a.m.) las concentraciones modeladas decrecieron fuertemente para el caso 1 y 2 mientras que para el caso 3 se obtuvieron concentraciones similares empleando

tanto las emisiones originales como las escaladas. Asimismo, en las estaciones de Iztacalco, Merced, Tlalnepantla y Santa Úrsula las concentraciones modeladas se acercaron a las observadas en horas distintas a la de análisis, sugiriendo que el factor de escalamiento se puede aplicar al día completo. Para UAM Iztapalapa, Amecameca, Tenango y Ozumba existen días en los que se obtienen mejores resultados empleando las emisiones escaladas, pero en otros las diferencias son menores si se utilizan las emisiones originales. Esto puede deberse a factores locales relacionados con las emisiones y la meteorología de estos sitios. Por ejemplo, García-Yee *et al.* (2017) encontró (para la campaña realizada en Amecameca, Tenango y Ozumba) que en días afectados por sistemas de baja presión (LPS) predominaron vientos del sur mientras que en días con sistemas de alta presión (HPS) dominaron vientos del norte. Por lo tanto, la variación de la concentración en estos sitios puede deberse a contribuciones locales, así como de otras regiones como la Ciudad del México (al norte) o Morelos y Puebla (al sur) dependiendo de los sistemas atmosféricos que influyan en la región (Maldonado *et al.* 2021).

Por otra parte, los valores de emisión anuales escalados para cada región tuvieron variaciones menores del 25% en la mayoría de las regiones. Además, es posible comparar las emisiones anuales de la región de la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM) del caso 1 con la suma de las regiones Ciudad de México y Estado de México del caso 2 y 3. Se obtuvo que para el caso 1 se estimó una emisión anual de 1.08 Tg/año mientras que para el caso 2 y 3, la suma corresponde a 1.03 Tg/año en ambos casos. Esto muestra que los valores de las emisiones de ambos inventarios convergieron hacia un mismo valor. Ahora bien, el inventario local 2008 de la ZMVM reporta un valor de 1.57 Tg/año (SMA-CDMX, 2010), mientras que el del año 2014, 0.69 Tg/año (SMA-CDMX, 2016), por lo que las emisiones calculadas en este trabajo de investigación se encuentran entre estos dos valores siguiendo una tendencia a la baja.

Respecto al el análisis hecho con las columnas medidas en el Centro de Ciencias de la Atmósfera y las columnas modelas, se observó una disminución en el error cuadrático medio y un aumento en el índice de concordancia al emplear las emisiones escaladas de ambos inventarios, traduciéndose en una mejora del desempeño del modelo respecto a las emisiones originales. Estos resultados apuntan en la misma dirección que la comparación con las columnas satelitales, respaldando los resultados obtenidos.

En este trabajo se consideraron todos los puntos coincidentes entre el satélite y el modelo, no obstante, es necesario resaltar cómo afectan las variables meteorológicas en las mediciones satelitales. Respecto al viento, se sabe que en cuanto mayor es su velocidad mayor será la dispersión de contaminantes, por lo que la concentración de CO será menor. En consecuencia, el satélite medirá una menor cantidad de moléculas. En caso contrario, cuando el viento es débil tenderá a haber mayor concentración.

Ahora bien, los instrumentos satelitales que miden en el infrarrojo (como IASI) tienen una alta sensibilidad en la troposfera media la cual disminuye cerca de la superficie. Generalmente esto está ligado al contraste térmico entre la superficie y la capa límite (Clerbaux *et al.*, 2009). Se ha encontrado que cuanto mayor sea esta diferencia mayor será la sensibilidad del instrumento en superficie (Bauduin *et al.*, 2016; Turquety *et al.*, 2009). Consecuentemente, el satélite mediría más o menos concentración de CO ocasionando que las diferencias con el modelo aumenten o disminuyan. Por lo tanto, es importante considerar la mayor cantidad de mediciones satelitales posibles (periodo de análisis amplio). Finalmente, las interferencias moleculares (H₂O, CO₂, etc.) en las mediciones satelitales de CO son reducidas debido al rango espectral que se emplea para recuperar este contaminante por lo que no afectan de forma importante la recuperación de este compuesto.

Dado que el principal sumidero del CO es su reacción con el radical hidroxilo (Figura 2.1), la estimación de la humedad en la atmósfera puede ser un factor importante

ya que algunas fuentes de este radical involucran el vapor de agua. Sin embargo, el CO tiene un tiempo de vida que varía entre semanas a meses en la tropósfera baja por lo que la destrucción de CO por el radical hidroxilo adquiere importancia en las capas altas de la troposfera donde la concentración de vapor de agua es menor.

8.- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Existe una incertidumbre muy grande en los inventarios de emisiones dada su frecuencia de publicación mayor o igual a tres años y a las diferentes metodologías empleadas en su estimación. Debido a esto es común utilizar factores de escalamiento aleatorios (pruebas de ensayo y error) para mejorar los resultados del modelo. El aporte de este trabajo consiste reducir esa incertidumbre al calcular factores de escalamiento mediante la comparación contra datos satelitales.

Los resultados mostrados para cada uno de los casos indican que es posible disminuir las diferencias entre datos observados y modelados tanto para columna total como para concentraciones en superficie de monóxido de carbono a las 10 a.m. Además, se encontró que puede utilizar un inventario anterior (2008) o un inventario posterior (2014) a la fecha de estudio (febrero 2011) y obtenerse valores similares de emisiones para ese periodo.

Se encontró que en superficie el desempeño del modelo mejoró significativamente al escalar las emisiones del año 2008 (RMSE disminuye y el índice de concordancia aumenta), mientras que, para los inventarios del 2014, se observó que el modelo predice concentraciones semejantes empleando emisiones originales o escaladas, por lo que los valores de los estadísticos tienen variaciones menores, siendo similares a los conseguidos con el inventario 2008 escalado. Por lo tanto, en modelaciones de calidad del aire se podrían usar tanto las emisiones escaladas del 2008 como las originales o escaladas del 2014 para el periodo analizado obteniendo resultados similares.

Respecto a la cantidad de regiones analizadas, se encontró que si se desea evaluar las emisiones y el desempeño del modelo en la Ciudad de México y el Área

Metropolitana se pueden utilizar 6 o 9 regiones de estudio. Utilizar más o menos regiones dependerá de qué tan específico necesite ser el estudio, de las capacidades de IASI para observar las concentraciones en superficie, así como de las mediciones disponibles para poder evaluar el desempeño del modelo. Por lo tanto, es necesario contar con observaciones continuas en superficie en todas las regiones para poder analizar el comportamiento del modelo en otras zonas.

Asimismo, se observó que los valores estimados de las emisiones totales convergieron sobre todo para el caso de la ZMVM, el cual es comparable en los tres casos de estudio. Estos resultados, así como los análisis en superficie y de columna, indican que el método funciona y podría ser utilizado para escalar las emisiones de monóxido de carbono para un periodo determinado, en caso de no contar con datos actualizados.

Finalmente, se recomienda evaluar periodos de comparación más grandes entre el satélite y el modelo (por ejemplo, un año), con el objetivo de analizar la estacionalidad del CO, cuyas concentraciones incrementan en invierno dado la quema de gases para el calentamiento de los hogares, así como los episodios de incendios en esta época del año. También sería oportuno realizar este estudio empleando datos de otros satélites, por ejemplo: MetOp-B, MetOp-C, TROPOMI, etc., dado que proporcionan información de la columna de CO en horas distintas a las realizadas en este trabajo, lo cual permitiría calcular factores de escalamiento a otras horas del día. De esta forma se podrían hacer comparaciones bajo distintas condiciones meteorológicas, es decir, diferente altura de la capa límite, temperatura, intensidad y dirección de vientos debido a los efectos que estas variables pueden producir en la concentración de CO medida y modelada.

REFERENCIAS

Bauduin S., Clarisse L., Theunissen M., George M., Hurtmans D., Clerbaux C., and Coheur P.-F. 2016. IASI's sensitivity to near-surface carbon monoxide (CO): Theoretical analyses and retrievals on test cases. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 189: 428-440. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.12.022.

Clerbaux C., George M., Turquety S., Walker K.A., Barret B., Bernath P., Boone C., Borsdorff T., Cammas J.P., Catoire V., Coffey M., Coheur P.-F., Deeter M., De Mazière M., Drummond J., Duchatelet P., Dupuy E., de Zafra R., Eddounia F., Edwards D.P., Emmons L., Funke B., Gille J., Griffith D.W.T., Hannigan J., Hase F., Höpfner M., Jones N., Kagawa A., Kasai Y., Kramer I., Le Flochmoën E., Livesey N.J., López-Puertas M., Luo M., Mahieu E., Murtagh D., Nédélec P., Pazmino A., Pumphrey H., Ricaud P., Rinsland C.P., Robert C., Schneider M., Senten C., Stiller G., Strandberg A., Strong K., Sussmann R., Thouret V., Urban J., and Wiacek A. 2008^a. CO measurements from the ACE-FTS satellite instrument: data analysis and validation using ground-based, airborne and spaceborne observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8: 2569-2594. DOI: 10.5194/acp-8-2569-2008.

Clerbaux C., Edwards D.P., Deeter M., Emmons L., Lamarque J.-F., Tie X. X., Massie S.T., and Gille J. 2008^b. Carbon monoxide pollution from cities and urban areas observed by the Terra/MOPITT mission. *Geophysical Research Letters*, 35: L03817. DOI:10.1029/2007GL032300.

Clerbaux C., Boynard A., Clarisse L., George M., Hadji-Lazaro J., Herbin H., Hurtmans D., Pommier M., Razavi A., Turquety S., Wespes C., and Coheur P.-F. 2009. Monitoring of atmospheric composition using the thermal infrared IASI/MetOp sounder. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9: 6041-6054. DOI: 10.5194/acp-9-6041-2009.

Crevoisier C., Clerbaux C., Guidard V., Phulpin T., Armante R., Barret B., Camy-Peyret C., Chaboureau J.-P., Coheur P.-F., Crépeau L., Dufour G., Labonnote L., Lavanant L., Hadji-Lazaro J., Herbin H., Jacquinet-Husson N., Payan S., Péquignot E., Pierangelo C., Sellitto P., and Stubenrauch, C. 2014. Towards IASI-New Generation (IASI-NG): impact of improved spectral resolution and radiometric noise on the retrieval of thermodynamic, chemistry and climate variables, *Atmos. Meas. Tech.*, 7, 4367–4385, <https://doi.org/10.5194/amt-7-4367-2014>.

De Foy B., Lei W., Zavala M., Volkamer R., Samuelsson J., Mellqvist J., Galle B., Martínez A.-P., Grutter M., Retama A., and Molina L.T. 2007. Modelling constraints on the emission inventory and on vertical dispersion for CO and SO₂ in the Mexico City Metropolitan Area using Solar FTIR and zenith sky UV spectroscopy. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7: 781-801. DOI: 10.5194/acp-7-781-2007.

De Wachter E., Barret B., Le Flochmoën E., Pavelin E., Matricardi M., Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., George M., Hurtmans D., Coheur P.-F., Nedelec P., and Cammas J.P. 2012. Retrieval of MetOp-A/IASI CO profiles and validation with MOZAIC data. *Atmospheric Measurements Techniques*, 5: 2843-2857. DOI:10.5194/amt-5-2843-2012.

Fagbeja M.A., Hill J.L., Chatterton T.J., and Longhurst J.W.S. 2015. A GIS-based assessment of the suitability of SCIAMACHY satellite sensor measurements for estimating reliable CO concentrations in a low-latitude climate. *Environmental Monitoring and Assessment*, 187: 4227. DOI: 10.1007/s10661-014-4227-2.

Fast J.D., Gustafson W.I. Jr., Easter R. C., Zaveri R.A., Barnard J. C., Chapman E. G., Grell G. A., and Peckham S.E. 2006. Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol model. *Journal of Geophysical Research*, 111: D21305. DOI: 10.1029/2005JD006721.

Fortems-Cheiney A., Chevallier F., Pison I., Bousquet P., Carouge C., Clerbaux C., Coheur P.-F., George M., Hurtmans D., and Szopa S. 2009. On the capability of IASI measurements to inform about CO surface emissions. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9: 8735-8743. DOI: 10.5194/acp-9-8735-2009.

Funke B., López-Puertas M., Bermejo-Pantaleón D., von Clarmann T., Stiller G.P., Höpfner M., Grabowski U., and Kaufmann M. 2007. Analysis of nonlocal thermodynamic equilibrium CO 4.7 μm fundamental, isotopic, and hot band emissions measured by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding on Envisat. *Journal of Geophysical Research*, 112: D11305. DOI:10.1029/2006JD007933.

García-Reynoso J. A., Mar-Morales B.E., and Ruiz-Suárez L.G. 2018. Modelo de distribución espacial, temporal y de especiación del inventario de emisiones de México (año base 2008) para su uso en modelización de calidad del aire (DiETE). *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 34 (4): 635-649. DOI: 10.20937/RICA.2018.34.04.07.

García-Yee J.S., Torres-Jardón R., Barrera-Huertas H., Castro T., Peralta O., García M., Gutiérrez W., Robles M., Torres-Jaramillo J.A., Ortíz Álvarez A., and Ruiz-Suárez L.G. 2017. Characterization of NO_x-O_x relationships during daytime interchange of air masses over a mountain pass in the Mexico City megalopolis. *Atmospheric Environment*, 177: 100-110. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2017.11.017.

George M., Clerbaux C., Hurtmans D., Turquety S., Coheur P.-F., Pommier M., Hadji-Lazaro J., Edwards D.P., Worden H., Luo M., Rinsland C., and McMillan W. 2009. Carbon monoxide distributions from the IASI/METOP mission: evaluation with other space-borne remote sensors. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9: 8317-8330. DOI: 10.5194/acp-9-8317-2009.

Grell G. A. 1993. Prognostic Evaluation of Assumptions Used by Cumulus Parameterizations. *Monthly Weather Review*, 121: 764–787. DOI:10.1175/1520-0493(1993)121<0764:PEOAUB>2.0.CO;2.

Grell G. A., and Dévényi D. 2002. A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques. *Geophysical Research Letters*, 29 (14). DOI:10.1029/2002GL015311.

Grell G. A., Peckham S.E., Schmitz R., McKeen S. A., Frost G., Skamarock W.C., and Eder B. 2005. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, 39: 6957-6975. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.

Hilton F., Armante R., August T., Barnet C., Bouchard A., Camy-Peyret C., Capelle V., Clarisse L., Clerbaux C., Coheur P.-F., Collard A., Crevoisier C., Dufour G., Edwards D., Fajjan F., Fourrié N., Gambacorta A., Goldberg M., Guidard V., Hurtmans D., Illingworth S., Jacquinet-Husson N., Kerzenmacher T., Klaes D., Lavanant L., Masiello G., Matricardi M., McNally T., Newman S., Pavelin E., Payan S., Péquignot E., Peyridieu S., Phulpin T., Remedios J., Schlüssel P., Serio C., Strow L., Stubenrauch C., Taylor J., Tobin D., Wolf W.,

and Zhou, D. 2012. Hyperspectral Earth Observation from IASI: Five Years of Accomplishments. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 93: 347-370. DOI: 10.1175/BAMS-D-11-00027.1.

Hurtmans D., Coheur P.-F., Wespes C., Clarisse L., Scharf O., Clerbaux C., Hadji-Lazaro J., George M., and Turquety S. 2012. FORLI radiative transfer and retrieval code for IASI. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113: 1391-1408. DOI:10.1016/j.jqsrt.2012.02.036.

Kerzenmacher T., Dils B., Kumps N., Blumenstock T., Clerbaux C., C., Coheur P.-F., Demoulin P., García O., George M., Griffith D. W. T., Hase F., Hadji-Lazaro J., Hurtmans D., Jones N., Mahieu E., Notholt J., Paton-Walsh C., Raffalski U., Ridder T., Schneider M., Servais C., and De Mazière M. 2012. Validation of IASI FORLI carbon monoxide retrievals using FTIR data from NDACC. *Atmospheric Measurements Techniques*, 5: 2751–2761. DOI:10.5194/amt-5-2751-2012.

Klonecki A., Pommier M., Clerbaux C., Ancellet G., Cammas J.-P., Coheur P.-F., Cozic A., Diskin G.S., Hadji-Lazaro J., Hauglustaine D.A., Hurtmans D., Khattatov B., Lamarque J.-F., Law K.S., Nedelec P., Paris J.-D., Podolske J.R., Prunet P., Schlager H., Szopa S., and Turquety S. 2012. Assimilation of IASI satellite CO fields into a global chemistry transport model for validation against aircraft measurements. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12: 4493–4512. DOI:10.5194/acp-12-4493-2012.

Kopacz M., Jacob D.J., Henze D.K., Heald C.L., Streets D.G., and Zhang Q. 2009. Comparison of adjoint and analytical Bayesian inversion methods for constraining Asian sources of carbon monoxide using satellite (MOPITT) measurements of CO columns. *Journal of Geophysical Research*, 114: D04305. DOI:10.1029/2007JD009264.

Kopacz M., Jacob D.J., Fischer J.A., Logan J.A., Zhang L., Megretskaja I.A., Yantosca R.M., Singh K., Henze D.K., Burrows J.P., Buchwitz M., Khlystova I., McMillan W.W., Gille J.C., Edwards D.P., Eldering A., Thouret V. and Nedelec P. 2010. Global estimates of CO sources with high resolution by adjoint inversion of multiple satellite datasets (MOPITT, AIRS, SCIAMACHY, TES). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10, 855-876, 2010. DOI: <https://doi.org/10.5194/acp-10-855-2010>

Liu J., Drummond J.R., Li Q., Gille J.C., and Ziskin D.C. 2005. Satellite mapping of CO emission from forest fires in Northwest America using MOPITT measurements. *Remote Sensing of Environment*, 95: 502-516. DOI: 10.1016/j.rse.2005.01.009.

López-Espinoza E.D., Zavala-Hidalgo J. and Gómez-Ramos O. 2011. Weather forecast sensitivity to changes in urban land covers using the WRF model for central México. *Atmósfera* 25(2), 127-154.

Luo M., Rinsland C.P., Rodgers C.D., Logan J.A., Worden H., Kulawik S., Eldering A., Goldman A., Shepard M. W., Gunson M. and Lampel M. 2007. Comparison of carbon monoxide measurements by TES and MOPITT: Influence of a priori data and instrument characteristics on nadir atmospheric species retrievals. *Journal of Geophysical Research*, 112: D09303. DOI:10.1029/2006JD007663.

Maldonado-Pacheco G., García-Reynoso J.A., Stremme W., Suárez-Ruiz L.G., Clerbaux C. and Coheur P.-F. 2021. Carbon monoxide emissions assessment by using satellite and modeling data: central Mexico case study. *Atmosfera*. DOI:10.20937/ATM.52696.

Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M. J., and Clough S. A.1997: Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research*, 102: 16663–16682. DOI:10.1029/97JD00237.

Marey H.S., Hashisho Z., Fu L., and Gille J. 2015. Spatial and temporal variation in CO over Alberta using measurements from satellites, aircraft, and ground stations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 15: 3893–3908. DOI: 10.5194/acp-15-3893-2015.

Matsui, T., Zhang S. Q., Tao W.-K., Lang S., Ichoku C. and Peters-Lidard C. 2018: Impact of radiation frequency, precipitation radiative forcing, and radiation column aggregation on convection-permitting West African Monsoon simulations. *Climate Dynamics*. DOI:10.1007/s00382-018-4187-2.

Ortega M. I. and Grutter M. 2009. Espectroscopia FTIR de absorción solar y lunar para la determinación en columna de CO en la capa de mezcla de la Ciudad de México. Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México.

Pétron G., Granier C., Khattatov B., Yudin V., Lamarque J., Emmons L., Gille J. and Edwards D.P., 2004. Monthly CO surface sources inventory based on the 2000-2001 MOPITT satellite data. *Geophysical Research Letters*, vol. 31, L21107. DOI:10.1029/2004GL020560

Pommier M., Law K.S., Clerbaux C., Turquety S., Hurtmans D., Hadji-Lazaro J., Coheur P.-F., Ancellet G., Paris J.-D., Nédélec P., Diskin G.S., Podolske J.R., Holloway J.S. and Bernath P. 2010. IASI carbon monoxide validation over the Arctic during POLACART spring and summer campaigns. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 10, 10655–10678, DOI: 10.5194/acp-10-10655-2010.

Rakitin V.S., Shtabkin Yu. A., Elansky N.F., Pankratova N.V., Skorokhod A.I., Grechko E.I., and Safronov A.N. 2015. Comparison Results of Satellite and Ground-Based Spectroscopic Measurements of CO, CH₄, and CO₂ Total Contents. *Atmospheric and Oceanic Optics*, 28: 533–542. DOI: 10.1134/S1024856015060135.

Rakitin V.S., Elansky N.F., Pankratova N.V., Skorokhod A.I., Dzhola A.V., Shtabkin Yu. A., Wang P., Wang G., Vasilieva A.V., Makarova M.V., and Grechko E.I. 2017. Study of Trends of Total CO and CH₄ Contents over Eurasia through Analysis of Ground-Based and Satellite Spectroscopic Measurements. *Atmospheric and Oceanic Optics*, 30: 517–526. DOI: 10.1134/S1024856017060112.

Rinsland C.P., Luo M., Logan J. A., Beer R., Worden H., Kulawik S.S., Rider D., Osterman G., Gunson M., Eldering A., Goldman A., Shepard M., Shepard A.C., Clough S.A., Rodgers C., Lampel M., and Chiou L. 2006. Nadir measurements of carbon monoxide distributions by the Tropospheric Emission Spectrometer instrument onboard the Aura Spacecraft: Overview of analysis approach and examples of initial results. *Geophysical Research Letters*, 33: L22806. DOI:10.1029/2006GL027000.

Rodgers C.D. 2000. Inverse Methods for Atmospheric Sounding, Theory and Practice. Series on Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics, volume 2. World Scientific Publishing.

Rodgers C.D. and Connor B.J. 2003. Intercomparison of remote sounding instruments. *Journal of Geophysical Research*, 108: 4116. DOI:10.1029/2002JD002299.

Schlüssel P., Hultberg T. H., Phillips P. L. T., August T., and Calbet X. 2005. The operational IASI Level 2 processor, *Adv. Space Res.*, 36, 982, doi:10.1016/j.asr.2005.03.008.

SEMARNAT: Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales: Estrategia Nacional de Calidad del Aire, Visión 2017-2030, disponible en: <https://www.gob.mx>, 2018.

SMA-CDMX: Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno de la Ciudad de México: Inventario de emisiones de contaminantes criterio de la ZMVM 2008, disponible en <http://www.aire.cdmx.gob.mx>, 2010.

SMA-CDMX: Secretaría del Medio Ambiente del Gobierno de la Ciudad de México: Inventario de emisiones de la CDMX 2014: Contaminantes criterio, tóxicos y de efecto invernadero, disponible en <http://www.aire.cdmx.gob.mx>, 2016.

Song–You H., Dudhia J. and Chen S.-H. 2004. A Revised Approach to Ice Microphysical Processes for the Bulk Parameterization of Clouds and Precipitation. *Monthly Weather Review*, 132: 103–120. DOI: 10.1175/1520-0493(2004)132< 0103:ARATIM>2.0.CO;2.

Song–You H., Noh Y. and Dudhia J. 2006. A New Vertical Diffusion Package with an Explicit Treatment of Entrainment Processes. *Monthly Weather Review*, 134: 2318–2341. DOI:10.1175/MWR3199.1.

Stremme W., Grutter M., Rivera C., Bezanilla A., Garcia A.R., Ortega I., George M., Clerbaux C., Coheur P.-F., Hurtmans D., Hannigan J.W., and Coffey M.T. 2013. Top-down estimation of carbon monoxide emissions from the Mexico Megacity based on FTIR measurements from ground and space. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13: 1357–1376. DOI:10.5194/acp-13-1357-2013.

Tanimoto H., Sato K., Butler T., Lawrence M.G., Fisher J.A., Kopacz M., Yantosca R.M., Kanaya Y., Kato S., Okuda T., Tanaka S., and Zeng J. 2009. Exploring CO pollution episodes observed at Rishiri Island by chemical weather simulations and AIRS satellite measurements: long-range transport of burning plumes and implications for emissions inventories. *Tellus Series B-Chemical and Physical Meteorology*, 61: 394–407. DOI: 10.1111/j.1600-0889.2008.00407.x.

Turquety S., Clerbaux C., Law K., Coheur P.-F., Cozic A., Szopa S., Hauglustaine D. A., Hadji-Lazaro J., Gloudemans A. M. S., Schrijver H., Boone C. D., Bernath P. F., and Edwards D. P. 2008. CO emission and export from Asia: an analysis combining complementary satellite measurements (MOPITT, SCIAMACHY and ACE-FTS) with global modeling. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8: 5187-5204. DOI: 10.5194/acp-8-5187-2008.

Turquety S., Hurtmans D., Hadji-Lazaro J., Coheur P.-F., Clerbaux C., Josset D., and Tsamalis C. 2009. Tracking the emission and transport of pollution from wildfires using the IASI CO retrievals: analysis of the summer 2007 Greek fires. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 9: 4897-4913. DOI: 10.5194/acp-9-4897-2009.

Wark K., Warner C., (1998). *Contaminación del aire, origen y control*. Limusa Noriega Editores

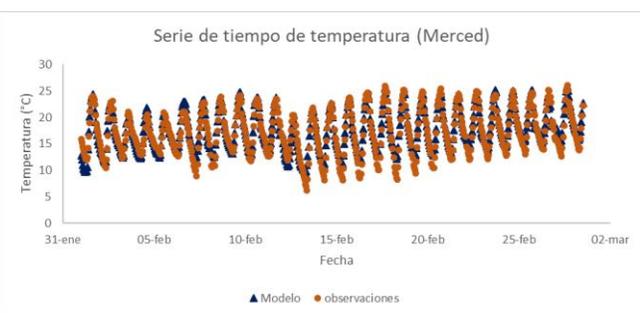
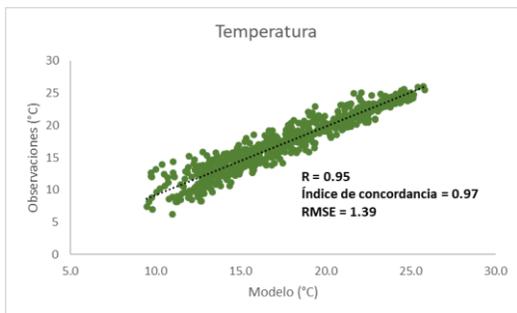
Willmott C. J. 1981. On the validation of models. *Physical Geography*, 2(2):184–194. DOI: 10.1080/02723646.1981.10642213.

ANEXO 1: Evaluación de las variables meteorológicas

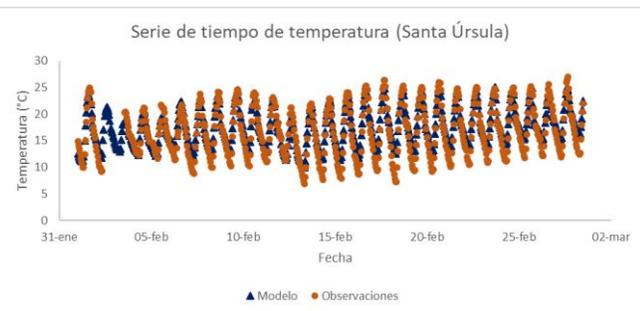
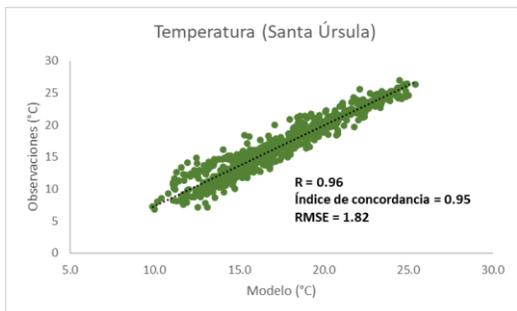
Se muestra la evaluación de las variables meteorológicas para los datos de observaciones disponibles en cada uno de los sitios de medición (la estación de Iztacalco y UAM Iztapalapa no cuentan con valores reportados en el periodo correspondiente al mes de febrero de 2011)

Temperatura

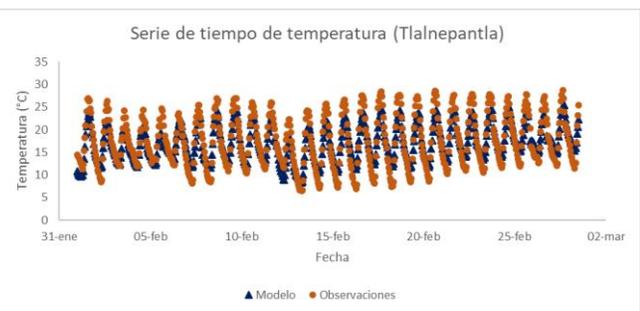
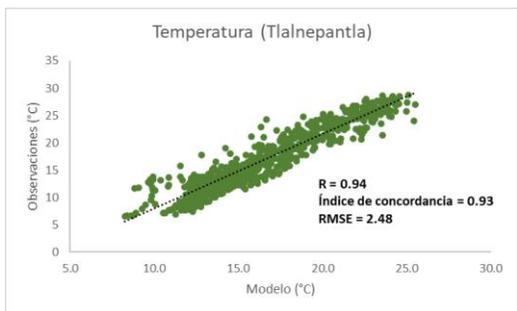
Merced



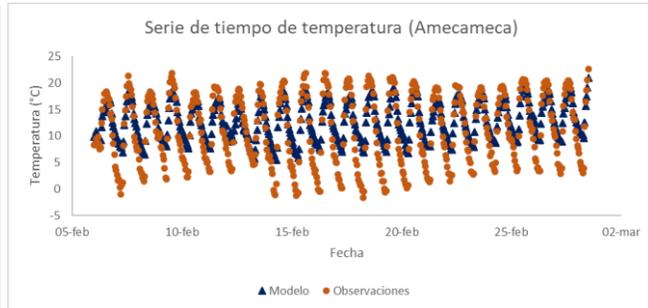
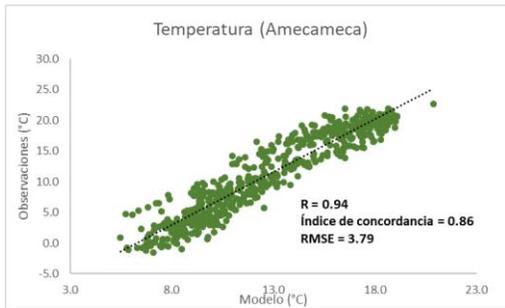
Santa Úrsula



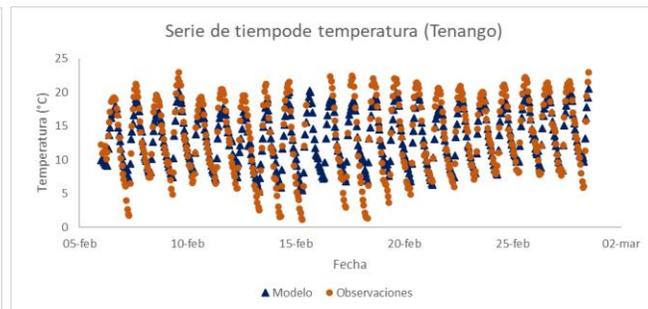
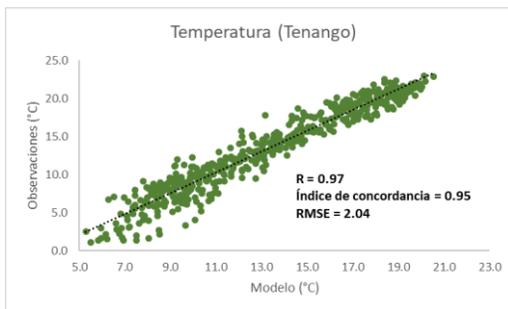
Tlalnepantla



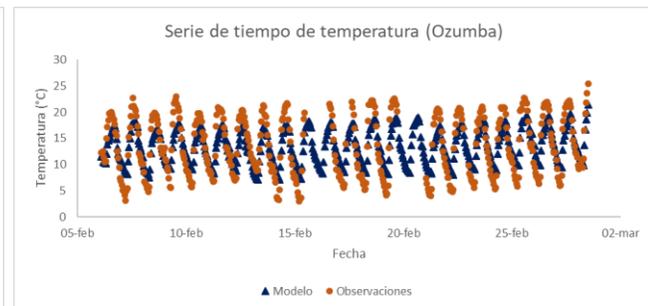
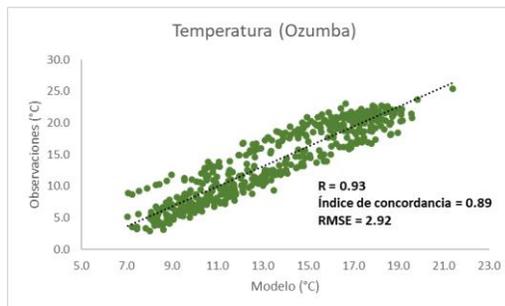
Amecameca



Tenango



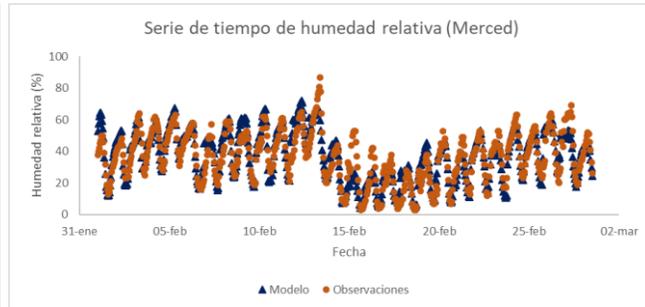
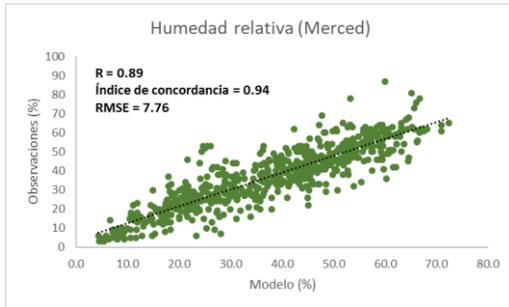
Ozumba



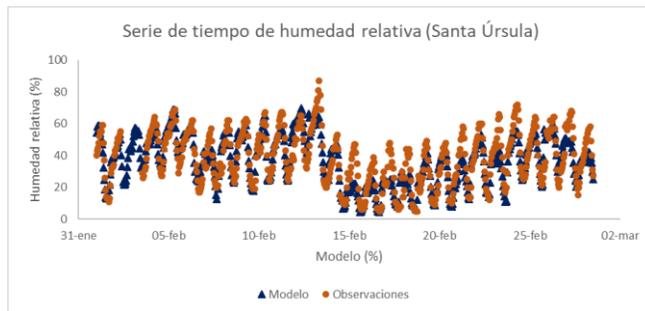
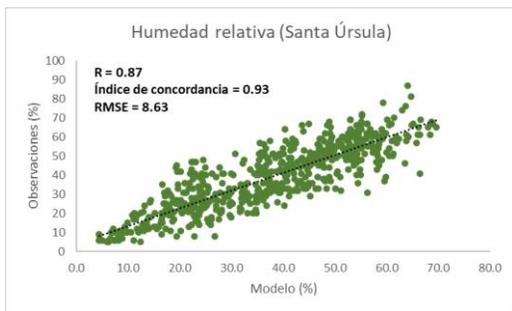
Para la variable de temperatura se encontraron índices de concordancia con valores mayores a 0.9 y RMSE menores a 3 °C en la mayoría de los sitios de medición. El mejor desempeño del modelo se observó en la estación de Iztacalco mientras que en Amecameca se obtuvieron las mayores diferencias.

Humedad relativa

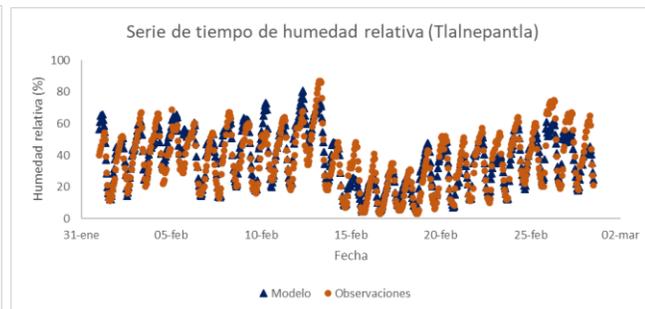
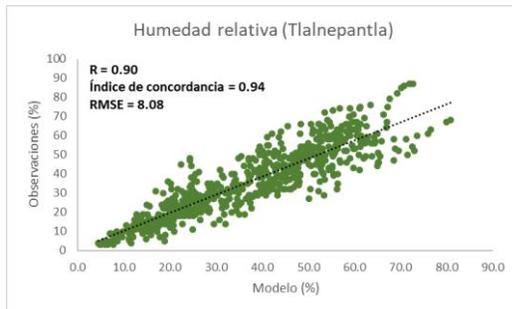
Merced



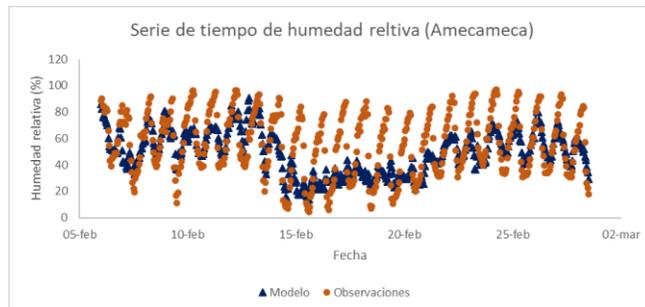
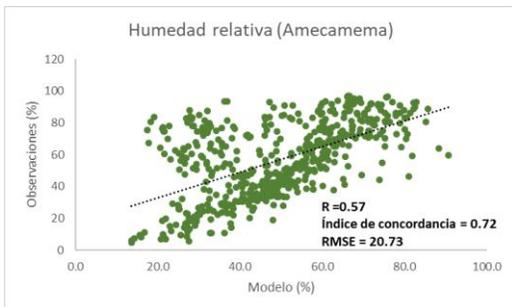
Santa Úrsula



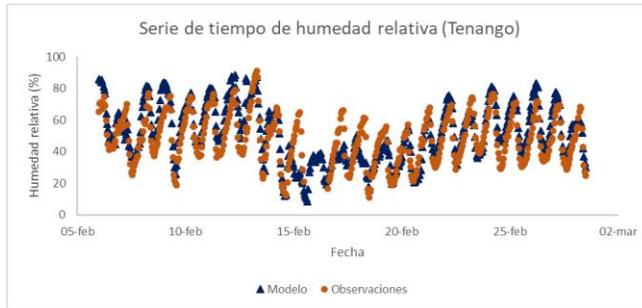
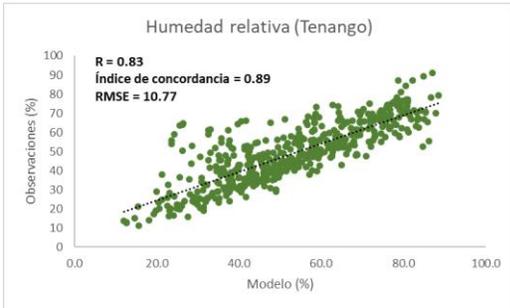
Tlalnepantla



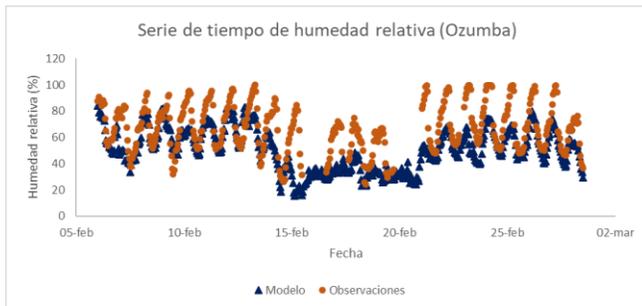
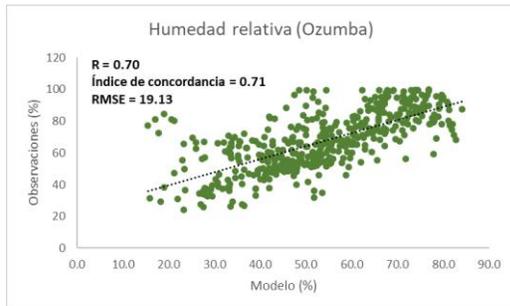
Amecameca



Tenango



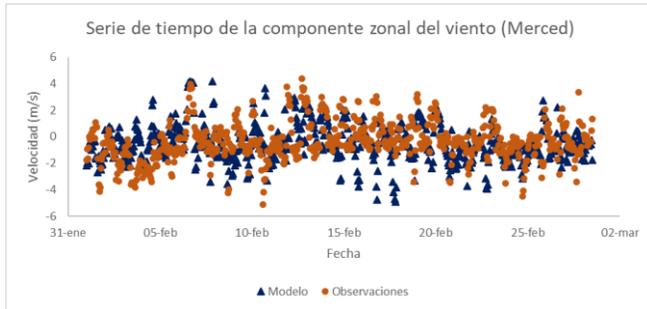
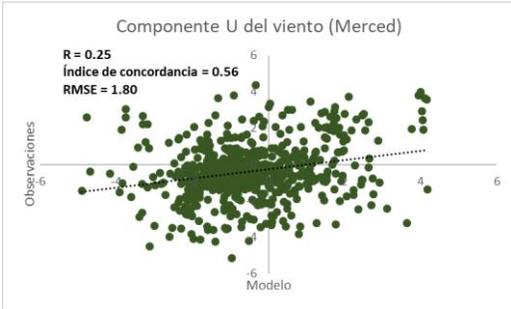
Ozumba



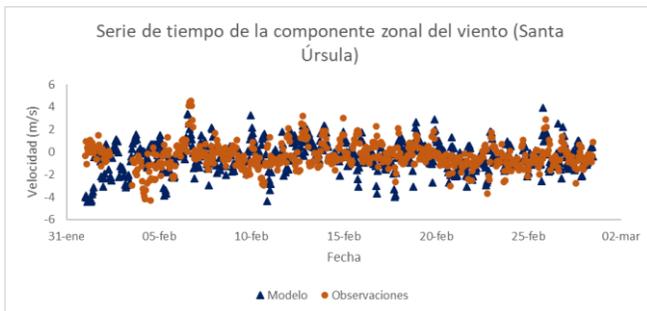
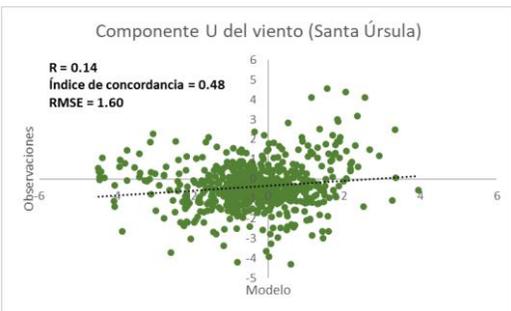
Para la variable de humedad relativa se encontraron índices de concordancia con valores mayores a 0.9 y RMSE menores a 9 (%) en las estaciones de la RAMA mientras que para los sitios de medición en el Estado de México se obtuvieron valores superiores a 0.7 e inferiores a 21(%) respectivamente. El mejor desempeño del modelo se observó en la estación de Iztacalco mientras que las diferencias más altas se encontraron en Amecameca.

Componente zonal del viento (U)

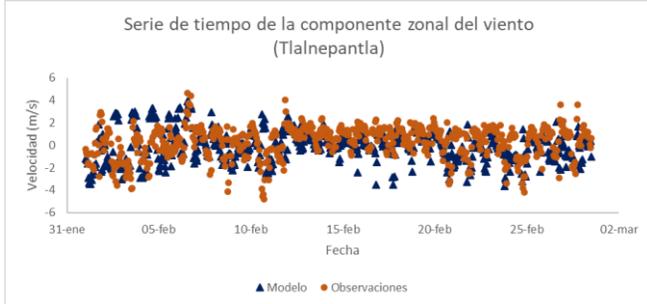
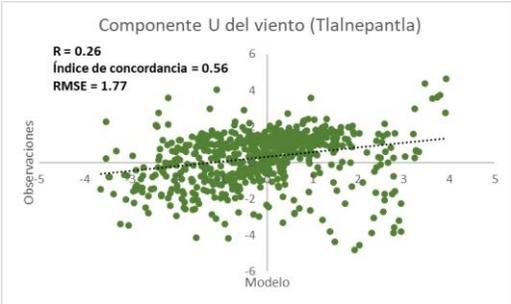
Merced



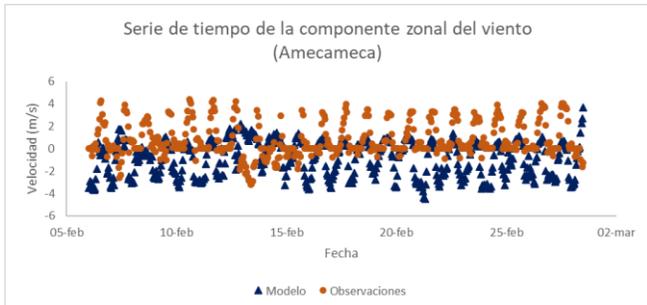
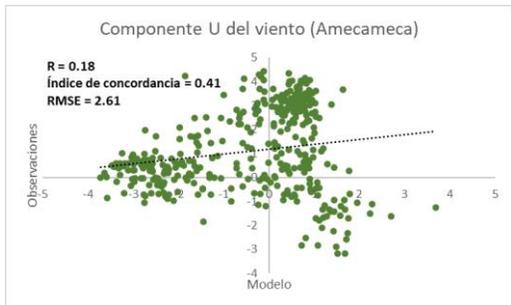
Santa Úrsula



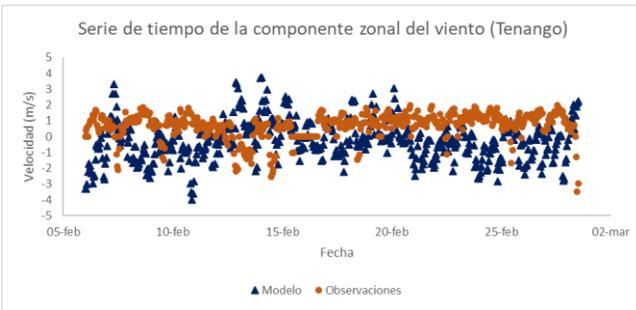
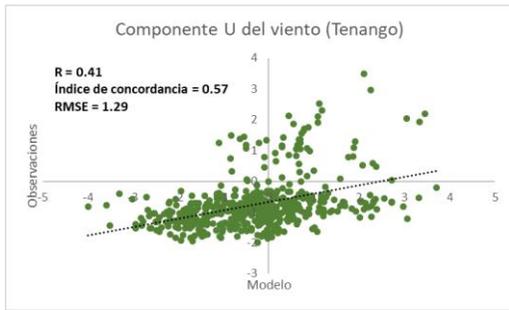
Tlalnepantla



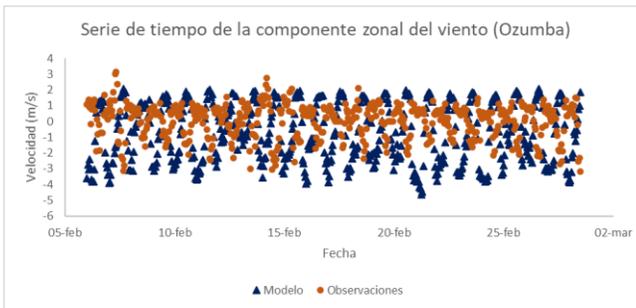
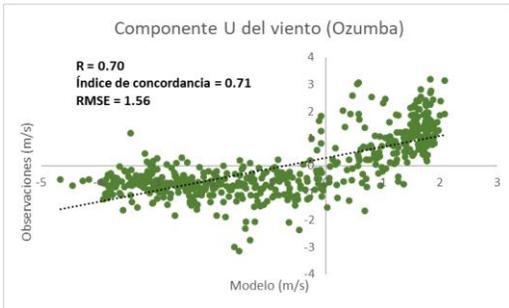
Amecameca



Tenango



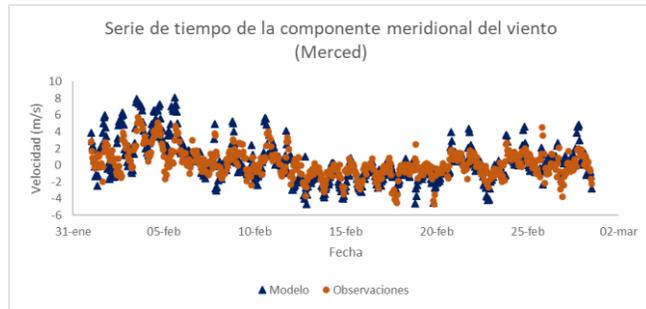
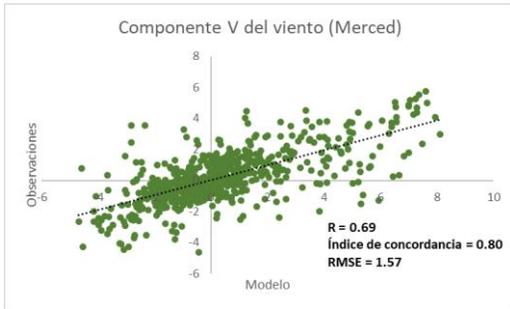
Ozumba



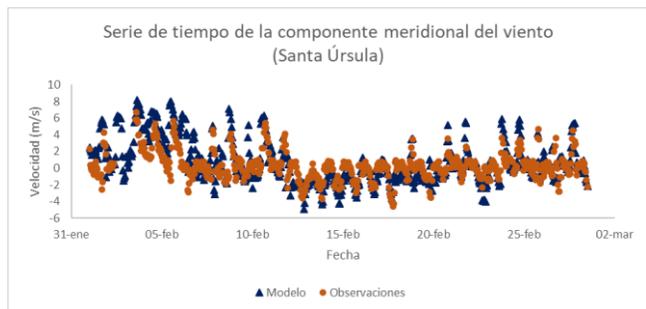
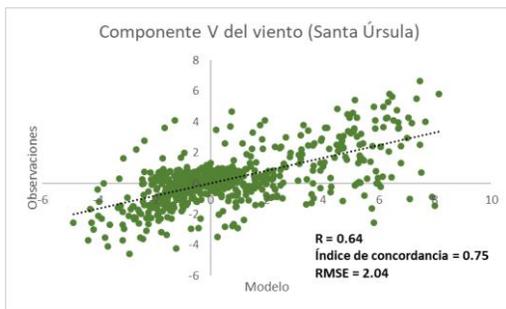
Para la componente zonal del viento se encontraron índices de concordancia con valores mayores a 0.5 y RMSE menores a 2 (m/s) en la mayoría de los sitios de medición. El mejor desempeño del modelo se observó en Ozumba mientras que en Amecameca se obtuvieron las mayores diferencias.

Componente meridional del viento (V)

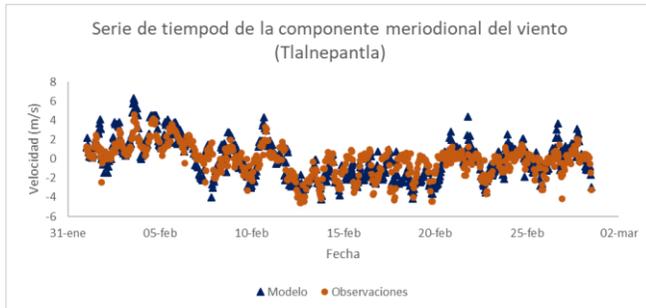
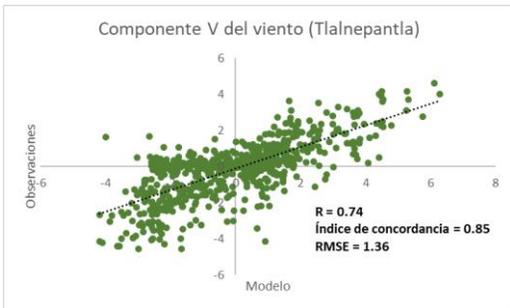
Merced



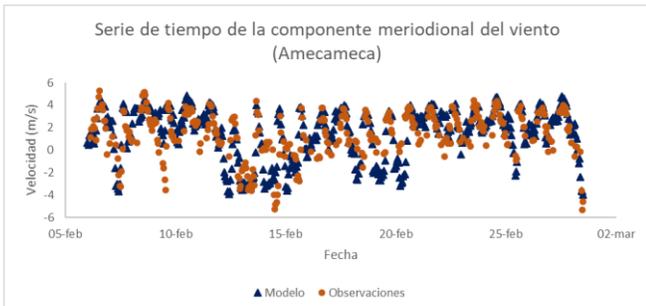
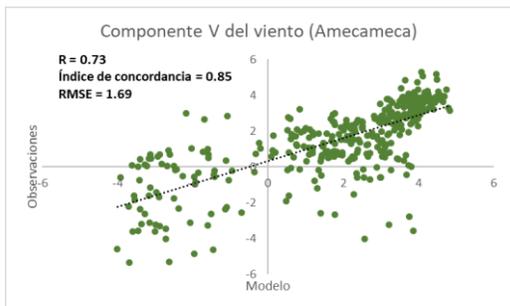
Santa Úrsula



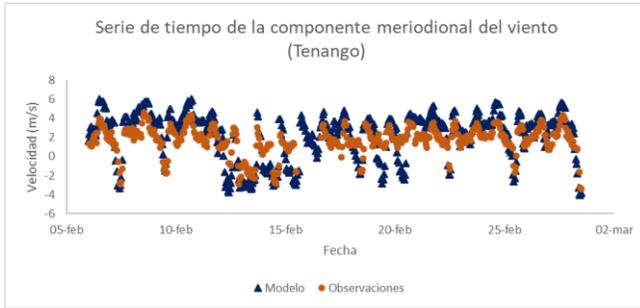
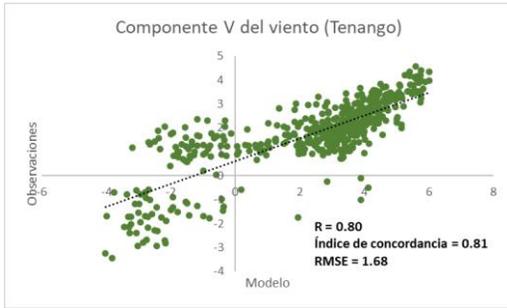
Tlalnepantla



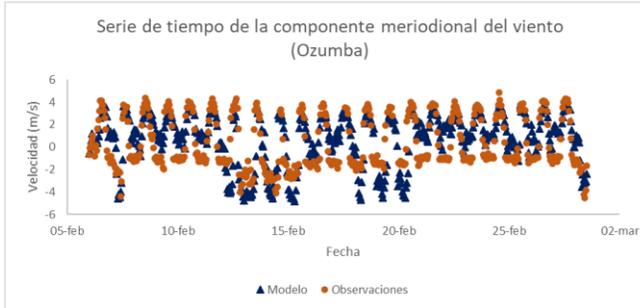
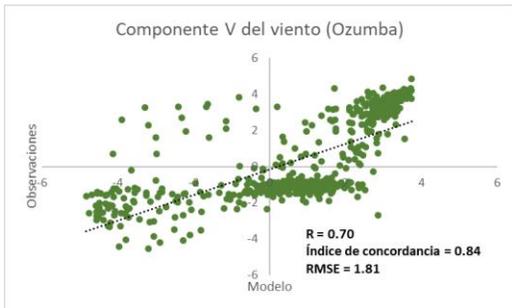
Amecameca



Tenango



Ozumba



Para la componente meridional del viento se encontraron índices de concordancia con valores superiores a 0.8 y RMSE menores a 2 (m/s) en la mayoría de los sitios de medición. El mejor desempeño del modelo se observó en Tlalnepantla mientras que las diferencias más altas se encontraron en Santa Úrsula.

ANEXO 2: Programas empleados en el cálculo de los factores de escalamiento

Cálculo de columnas de modelo

Programa general

```
#!/bin/csh -f

set Hr = (16)
set Mes =(febrero)

foreach hora ($Hr)
  foreach month ($Mes)
    printf "\n\nComputations for mes %s Hour = %s\n" $month $hora
    set InFiles = (wrfout_d01_2011-02*_${hora}:00:00)

    set Num = 0
    foreach file ($InFiles)
      @ Num ++
      echo $Num
      /tmpu/agr_g/gmp_a/ARWpost/util/A $file > temp1
      grads -lbc 'satelite_pron1_z.gs' > temp2
      ./lee_wrf_alt.exe > temp3
      if ($Num<10) then
        mv satel.txt $month-0${Num}_hr${hora}_mex_d01.txt
      else
        mv satel.txt $month-${Num}_hr${hora}_mex_d01.txt
      endif
    end

    printf "\nDone with Satellite output processing for Hour %s %s\n" $hora $month
  end
end
```

Extracción de variables y cálculo de las columnas parciales

```
* Extrae los datos del WRF en la vertical
'reinit'
say open ARWout_W.ct1
'open ARWout_W.ct1'
'set x 1 212'; 'set y 1 201'
hora=1

z.1= 1 ;z.16=16;z.31=31
z.2=2 ;z.17=17
z.3=3 ;z.18=18
z.4=4 ;z.19=19
z.5=5 ;z.20=20
z.6=6 ;z.21=21
z.7=7 ;z.22=22
z.8=8 ;z.23=23
z.9=9 ;z.24=24
z.10=10;z.25=25
z.11=11;z.26=26
z.12=12;z.27=27
z.13=13;z.28=28
```

```

z.14=14;z.29=29
z.15=15;z.30=30
i=1
*tiempo = 1
tiempo=hora
'set t 'tiempo
'q dims'
say result
'set gxout fwrite '
while (tiempo <2)
'set t 'tiempo
while(i<31)
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl altus.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap altus.dat'
endif
h.i=' (ph(z='z.i')+phb(z='z.i'))/9.81'
'd'h.i''
'disable fwrite'
i=i+1
* de altura
endwhile
i=1
while(i<30)
j=i+1
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl capas.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap capas.dat'
endif
capa.i = ('h.j' -' h.i')'
'd 'h.j' -' h.i''
'disable fwrite'
i=i+1
*de capa
tiempo=tiempo+1
endwhile
* De tiempo
endwhile
'set gxout shaded'
'd 'capa.1
'close 1'
*
* Cálculo de concentraciones
*
'clear'
'open ARWout_M.ct1'

'set x 1 212';'set y 1 201'
'set gxout fwrite '
* Guarda lat
'set fwrite -be -sq -cl d_lat.dat'
'd xlat'
'disable fwrite'
* Guarda lon
'set fwrite -be -sq -cl d_lon.dat'
'd xlong'
'disable fwrite'
*
tiempo = hora
'set t 'tiempo
i=1

```

```

* Avogadro molec/mol
Av=6.023E23
* mL atm/K mgmol
R= 82.057
*
*while(tiempo<2)
while(i<30)
* Referece pression 101352 Pa
pres = '(p(z='z.i')+pb(z='z.i'))/101325'
ff = 'pow('pres',0.2854)'
TK = '(T(z='z.i')+300) * 'ff
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_so2.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_so2.dat'
endif
'd so2(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
'set gxout fwrite '
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_hcho.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_hcho.dat'
endif
'd hcho(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_hc3.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_hc3.dat'
endif
'd hc3(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_tol.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_tol.dat'
endif
'd tol(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_oli.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_oli.dat'
endif
'd oli(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_ol2.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_ol2.dat'
endif
'd ol2(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_olt.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_olt.dat'
endif
'd olt(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_eth.dat'

```

```

else
'set fwrite -be -sq -ap c_eth.dat'
endif
'd eth(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl c_co.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap c_co.dat'
endif
'd co(z='z.i')*'Av'/'TK'*'pres'/'R'/'1000000
'disable fwrite'
if(i=1)
'set fwrite -be -sq -cl m_pre.dat'
else
'set fwrite -be -sq -ap m_pre.dat'
endif
'd 'pres
'disable fwrite'

i=i+1
endwhile
*
'set fwrite -be -sq -cl c_pbl.dat'
'd pblh'
'disable fwrite'

'set fwrite -be -sq -cl c_hgt.dat'
'd hgt'
'disable fwrite'
*tiempo=tiempo+1
*endwhile
'quit'

```

Impresión de los valores de columna parciales en archivos de texto

```

program lee_capas
implicit none
integer :: i,j,ii
integer :: nlevs,nlevs2,nx,ny,nxy,nvert,nf
parameter (nx=212,ny=201,nxy=nx*ny,nvert=30,nf=12)
integer :: iunit=10, ounit=60, hora
real,dimension(nxy) :: dvar,lat,lon, pbl, hgt
real,dimension(nxy,nvert,nf) :: variable,variable2
real,dimension(nxy,nf) :: suma
character(len=10),dimension (nf) :: cfile

data cfile
/'capas.dat','altus.dat','m_pre.dat','c_so2.dat','c_hcho.dat','c_hc3.dat', &
&
'c_oli.dat','c_ol2.dat','c_eth.dat','c_tol.dat','c_olt.dat','c_co.dat'/
!
suma = 0.00
open(unit=iunit,file='c_pbl.dat',ACCESS='sequential',&
& status='old',action='read',convert='big_endian', &
& form='unformatted')
read(iunit,END=125) pbl
125 close(iunit)
open(unit=iunit,file='c_hgt.dat',ACCESS='sequential',&
& status='old',action='read',convert='big_endian', &
& form='unformatted')

```

```

    read(iunit,END=130) hgt
130 close(iunit)
    do ii=1,nf
    print *, 'lee ', cfile(ii)
    open(unit=iunit, file=cfile(ii), ACCESS='sequential', &
&      status='old', action='read', convert='big_endian', &
&      form='unformatted')
        do i=1,nvert
        read(iunit,END=100) dvar
        do j=1,nxy
        variable(j,i,ii)=dvar(j)
        end do
        end do
100 close(iunit)
    if(ii.ge.4) then
    do i=1,nvert
    do j=1,nxy
        suma(j,ii)= suma(j,ii) + variable(j,i,1)*100* variable(j,i,ii)
        variable2(j,i,ii)= variable(j,i,1)*100* variable(j,i,ii)
        end do
    end do
    end if
    end do
    open(unit=iunit, file='d_lat.dat', ACCESS='sequential', &
&      status='old', action='read', convert='big_endian', &
&      form='unformatted')
    read(iunit,END=110) lat
110 close(iunit)
    open(unit=iunit, file='d_lon.dat', ACCESS='sequential', &
&      status='old', action='read', convert='big_endian', &
&      form='unformatted')
    read(iunit,END=120) lon
120 close(iunit)

    open (ounit, file='archivo.txt')

    do j=1,nxy
        write(60,220) lat(j), lon(j), (variable(j,i,2), i=2, nvert) &
&      , (variable(j,i,3), i=1, nvert-1), (variable2(j,i,4), i=1, nvert-1) &
&      , (variable2(j,i,5), i=1, nvert-1), (variable2(j,i,6), i=1, nvert-1) &
&      , (variable2(j,i,7), i=1, nvert-1), (variable2(j,i,8), i=1, nvert-1) &
&      , (variable2(j,i,9), i=1, nvert-1), (variable2(j,i,10), i=1, nvert-1) &
&      , (variable2(j,i,11), i=1, nvert-1), (variable2(j,i,12), i=1, nvert-1) &
&      , pbl(j), hgt(j)
    end do
220 format(2f11.5,29f10.2,29f9.3,261ES14.7,2f11.5)
    end program

```

Conversión de archivos de texto a formato hdf5

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import datetime
import h5py
import glob

filename='febrero-10_hr16_mex_d01.txt'

def filenametodate(filename):
    year='2011'
    mes=filename.split('-')[0][0:10]

```

```

day=filename.split('-')[1][0:2]
hour=int((filename.split('-')[1]).split('_')[1][2:4])
meses=['enero', 'febrero', 'marzo', 'abril', 'mayo', 'junio', 'julio', 'agosto', 'septiembre', 'octubre', 'noviembre', 'diciembre']
for i,elmes in enumerate(meses):
    if mes ==elmes:
        mes='%02d' % (i+1)
        sdate=year+mes+day
        return sdate,hour

```

```

def readonegridpoint(vec):
    modeltype=np.dtype([('lat', float), ('lon', float), ('z', float, 29), ('p', float, 29), ('SO2', float, 29), ('HCHO', float, 29), ('HC3', float, 29), ('OLI', float, 29), ('OL2', float, 29), ('ETH', float, 29), ('TOL', float, 29), ('OLT', float, 29), ('CO', float, 29), ('pbl', float), ('hgt', float)])
    onetime=np.zeros((1), dtype=modeltype)[0]
    onetime['lat']=float(vec[0])
    onetime['lon']=float(vec[1])
    onetime['z'][:]=np.array(vec[2:30+1], dtype=float)
    onetime['p'][:]=np.array(vec[31:59+1], dtype=float)
    onetime['SO2'][:]=np.array(vec[60:88+1], dtype=float)
    onetime['HCHO'][:]=np.array(vec[89:117+1], dtype=float)
    onetime['HC3'][:]=np.array(vec[118:146+1], dtype=float)
    onetime['OLI'][:]=np.array(vec[147:175+1], dtype=float)
    onetime['OL2'][:]=np.array(vec[176:204+1], dtype=float)
    onetime['ETH'][:]=np.array(vec[205:233+1], dtype=float)
    onetime['TOL'][:]=np.array(vec[234:262+1], dtype=float)
    onetime['OLT'][:]=np.array(vec[263:291+1], dtype=float)
    onetime['CO'][:]=np.array(vec[292:320+1], dtype=float)
    onetime['pbl']=float(vec[321])
    onetime['hgt']=float(vec[322])
    return onetime

```

```

def getonehour(filename):
    sdate,hour=filenametodate(filename)
    modelvaltype=np.dtype([('lat', float), ('lon', float), ('z', float, 29), ('p', float, 29), ('SO2', float, 29), ('HCHO', float, 29), ('HC3', float, 29), ('OLI', float, 29), ('OL2', float, 29), ('ETH', float, 29), ('TOL', float, 29), ('OLT', float, 29), ('CO', float, 29), ('pbl', float), ('hgt', float)])
    modelvaldatos=np.zeros((1), dtype=modelvaltype)

    f=open(filename, 'r')
    lines=f.read().splitlines()
    f.close()
    for iline,line in enumerate(lines):

        dato=readonegridpoint(line.split())
        modelvaldato=np.zeros((1), dtype=modelvaltype)[0]
        modelvaldato['lat']=dato['lat']
        modelvaldato['lon']=dato['lon']
        modelvaldato['z'][:]=dato['z'][:]
        modelvaldato['p'][:]=dato['p'][:]
        modelvaldato['SO2'][:]=dato['SO2'][:]
        modelvaldato['HCHO'][:]=dato['HCHO'][:]
        modelvaldato['HC3'][:]=dato['HC3'][:]

        modelvaldato['OLI'][:]=dato['OLI'][:]
        modelvaldato['OL2'][:]=dato['OL2'][:]
        modelvaldato['ETH'][:]=dato['ETH'][:]

```

```

        modelvaldato['TOL'][:]=dato['TOL'][:]

        modelvaldato['OLT'][:]=dato['OLT'][:]
        modelvaldato['CO'][:]=dato['CO'][:]
        modelvaldato['pbl']=dato['pbl']
        modelvaldato['hgt']=dato['hgt']
        modelvaldatos=np.append(modelvaldatos,modelvaldato)
        return modelvaldatos[1:],sdate+'/%0i' % (hour)

lista=glob.glob('*_mex_d01.txt')
for filename in lista:
    print 'filename:',filename
    datos,sdate=getonehour(filename)

    try:
        f=h5py.File('archivo.h5','r+')
    except:
        f=h5py.File('archivo.h5','w')
    f.create_dataset(sdate,data=datos)
    f.flush()
    f.close()

```

Comparación de datos satelitales con datos modelados

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import datetime
import h5py
import glob

ziasi=1000.0*(np.arange(19)+0.5)

def getmodeldata(f,sdate0,shora,lat,lon,name):
    dset=f[sdate0+'/'+shora]
    imin=np.argmin((dset['lat']-lat)**2+(dset['lon']-lon)**2)
    return
np.array(dset[imin]['z']),np.array(dset[imin][name]),lat,lon,dset[imin]['lat'],ds
et[imin]['lon']
def getcoincidentdata(name):

    filename_modelo='archivo.h5'

    fmodelo=h5py.File(filename_modelo,'r')

    colsat=[]
    colsatorg=[]
    colmodelo=[]
    colmodelosuave=[]
    latmodel_coinc=[]
    lonmodel_coinc=[]
    latsatel_coinc=[]
    lonsatel_coinc=[]
    tsat=[]
    alturatop=[]
    latdsetarr=[18,19,20]
    londsetarr=[-97,-98,-99]

```

```

filelista_sat=glob.glob('files*.h5')
satfile=filelista_sat[0]

for satfile in filelista_sat:
try:

fsat=h5py.File(satfile,'r')

metopsat='A'
namegroupsat= fsat[metopsat].keys()[0].strip()

for latdset in latdsetarr:
for londset in londsetarr:
cuadra='%dN%dW'%(latdset,londset)

filenamesat=metopsat+'/'+namegroupsat+'/'+cuadra

dsetsat=fsat[filenamesat]

for dato in dsetsat:
sdate0=dato['date']
time=dato['time']
shora=time[0:2]
lat=dato['lat']
lon=dato['lon']
if time[4:6] == '60':
time=time[:4]+'59'
t=datetime.datetime.strptime(sdate0+time,"%Y%m%d%H%M%S")

try:

zmodelo, CModelo, latsatel, lonsatel, latmodel, lonmodel = getmodeldata
(fmodelo,sdate0,shora,lat,lon,name)

latsatel_coinc.append(latsatel)
lonsatel_coinc.append(lonsatel)
latmodel_coinc.append(latmodel)
lonmodel_coinc.append(lonmodel)

tsat.append(t)
alturatop.append(min(zmodelo))
aksat=np.array(dato['AK_tot'])
index=np.where(aksat < -998.0)[0]
aksat[index]=0.0

akint=np.interp(zmodelo,ziasi,aksat)
xapr=np.array(dato['xa'])
colsuave=np.dot(akint,CModelo)
colmodelosuave.append(colsuave)
colsatorg.append(dato['co_tot'])
colsat.append(dato['co_tot']-np.dot((1.0-aksat),xapr))

colmodelo.append(np.sum(CModelo))
except:
pass
fsat.close()
except:
print 'no files'

return
colsat,colsatorg,colmodelo,colmodelosuave,alturatop,tsat,latsatel_coinc,lonsatel_

```

```

coinc,latmodel_coinc,lonmodel_coinc

sitios=['CMDX','Mexico_alr','Edo_hid','Toluca','Edo_mor','Puebla','Tlaxcala','Otr
as_reg','Boundy']
aliassitios=['SO2','HCHO','HC3','OLI','OL2','TOL','ETH','OLT','CO']

for i,sitio in enumerate(sitios):
    alias=aliassitios[i]
    print alias

colsat,colstorg,colmodelo,colmodelosuave,alturatop,tsat,latsatel_coinc,lonsatel_
coinc,latmodel_coinc,lonmodel_coinc=getcoincidentdata(alias)

    np.save(sitio+'_suave_'+alias,colmodelosuave)
    np.save(sitio+'_modelo_'+alias,colmodelo)

dayofyear=np.array([(ttsat-datetime.datetime(2011,1,1,0,0,0)).days for ttsat in
tsat])

fmodelo.close()

```

Cálculo de factores de escalamiento

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import datetime
import h5py
import glob

sitios=['CMDX','Mexico_alr','Edo_hid','Toluca','Edo_mor','Puebla','Tlaxcala','Otr
as_reg','Boundy']
aliassitios=['SO2','HCHO','HC3','OLI','OL2','TOL','ETH','OLT','CO']
latmodel=np.load('latmodel.npy')
lonmodel=np.load('lonmodel.npy')
latsatel=np.load('latsatel.npy')
lonsatel=np.load('lonsatel.npy')

sat=np.load('colsat.npy')
zground=np.load('alturatop.npy')
dayofyear=np.load('dayofyear.npy')

y=sat
nsitios=len(sitios)
ndata=len(sat)
ntimecoef=8
Kmat=np.zeros((ndata,nsitios))

for i,sitio in enumerate(sitios):
    alias=aliassitios[i]
    vec=np.load(sitio+'_suave_'+alias+'.npy')
    vec[:]=vec[:]/
    Kmat[:,i]=vec[:]/
    legend.append(sitio)

KTK=np.dot(Kmat.T,Kmat)
nparam=len(Kmat[0,:])
KTKinv=np.linalg.inv(KTK)
Gain=np.dot(KTKinv,Kmat.T)

```

```
x=np.dot(Gain,y)

yfit=np.dot(Kmat,x)

A=np.dot(Gain,Kmat)
dof=np.trace(A)

x0=np.ones((len(x)))
yfit0=np.dot(Kmat,x0)
diff=yfit-y
rms=np.std(diff)

nparam=len(x)
npt=len(y)
Sy=np.identity(npt)*rms**2
Serror=np.dot(np.dot(Gain,Sy),Gain.T)
xerr=np.sqrt(np.diagonal(Serror))
xname=sitios

print 'columna_total: ', x ,'+/-',xerr[i],'err in percentage:',xerr/x*100.0
```